



UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA
BARCELONATECH

Escola Politècnica Superior d'Enginyeria
de Manresa



La destil·lació reactiva al laboratori

TREBALL FINAL DE GRAU

Grau en Enginyeria Química

Gloria Castilla Ballesteros
Tutora: Anna Bonsfills Pedrós
Juliol 2016

RESUM DEL PROJECTE

La destil·lació reactiva es fonamenta en fer servir la columna de destil·lació com a propi reactor químic i en el principi de la destil·lació, separar els productes gràcies a la diferència entre els seus punts d'ebullició, per tal de millorar el rendiment d'ambdós processos.

En aquest treball s'estudia en profunditat tot el que engloba a aquest tipus de destil·lació, focalitzant en la determinació experimental d'un procés a escala de laboratori amb el posterior disseny i implementació de la mateixa i que aquesta serveixi com a pràctica docent d'Experimentació en Enginyeria Química.

Paraules clau: destil·lació reactiva, metanol – àcid acètic, simulació, escala de laboratori.

PROJECT SUMMARY

Reactive distillation is based on the use of a column as a chemical reactor and the principle of distillation to separate the products thanks to the difference between their boiling points. The objective is to improve the performance of both processes.

This project studies this type of distillation profoundly, this study focuses experimental determination of a laboratory scale process with the subsequent design and implementation of the same. This serves as a teaching practice in the subject of Experimentation in Chemical Engineering.

Key words: reactive distillation, methanol – acetic acid, simulation, laboratory scale.

ÍNDEX 1

1. Antecedents.....	13
2. Objectius.....	15
3. Introducció a la destil·lació reactiva.....	16
3.1. En què consisteix la destil·lació reactiva?.....	16
3.2. Configuracions possibles de la destil·lació reactiva.....	16
3.2.1. Columna de destil·lació amb reacció.....	16
3.2.2. Columna de destil·lació amb un reactor extern i concentració d'inerts baixa.....	17
3.2.3. Columna de destil·lació amb un reactor extern i concentració d'inerts elevada.....	19
3.2.4. Columna de destil·lació amb el calderí com a reactor.....	19
3.2.5. Columna reactiva amb calderí i condensador, ambdós reactius.....	19
3.3. Tipus de columnes.....	20
3.3.1. Columnes de plats.....	20
3.3.1.1. Eficiència dels plats.....	23
3.3.2. Columnes de rebliment.....	26
3.3.2.1. Eficiència d'una columna de rebliment.....	27
3.3.2.2. Altura equivalent d'un plat teòric.....	27
3.4. Tipus d'equips en els quals té lloc la destil·lació amb reacció.....	28
3.4.1. Equip per una destil·lació amb reacció homogènia.....	28
3.4.2. Equip per una destil·lació amb reacció heterogènia.....	30
3.5. Avantatges i inconvenients de la destil·lació reactiva.....	35
4. Aplicacions industrials.....	37
5. Models de la destil·lació reactiva.....	43
5.1. Models d'equilibri.....	43
5.1.1. Característiques generals.....	43
5.1.2. Equacions del model d'equilibri (sistema d'equacions MESH).....	43
5.2. Modificació del model d'equilibri: mètode de Doherty.....	45
5.3. Modificació del model d'equilibri: un model basat en l'element.....	45
5.4. Models basats en la freqüència.....	46
6. Model matemàtic.....	47
6.1. Mètodes de càlcul.....	51
6.1.1. Mètodes aproximats.....	51
6.1.2. Mètodes rigorosos.....	56
7. Mètodes experimentals per determinar la fase d'equilibri en sistemes amb reacció.....	61
7.1. Equilibri líquid-vapor.....	62
7.1.1. Experiments Batch.....	62
7.1.2. Experiments de Cabal.....	62
7.1.3. Experiments de Recirculació.....	63
8. HYSYS: Programa de Simulació.....	64
8.1. Què és el HYSYS?	64
8.2. Tipus de <i>Fluid Package</i>	65
8.3. Models matemàtics per la termodinàmica.....	67
8.4. Models matemàtics per les reaccions.....	68

8.4.1. Conversió.....	68
8.4.2. Equilibri.....	69
8.4.3. Cinètica	72
8.4.4. Catàlisi heterogènia.....	74
8.4.5. Reacció simple	77
9. Estudi d'una reacció d'esterificació en una columna de destil·lació al laboratori.....	78
9.1. Importància a nivell industrial.....	78
9.2. Característiques dels reactius i productes.....	80
9.2.1. Metanol.....	80
9.2.2. Àcid acètic.....	80
9.2.3. Acetat de Metil.....	81
9.2.4. Aigua.....	81
9.3. Paràmetres físics i químics dels reactius i productes.....	81
9.4. Equilibri líquid-vapor àcid acètic i metanol.....	82
9.5. Estudi dels diferents casos de treball en el HYSYS per la destil·lació reactiva a escala industrial.....	84
9.5.1. Paràmetres i condicions de treball.....	84
9.5.2. Configuracions possibles.....	90
9.6. Configuració i condicions d'operació pel nostre estudi a escala industrial.....	95
9.6.1. Característiques dels plats	95
9.6.2. Característiques del condensador.....	96
9.6.3. Característiques del calderí.....	96
9.7. Resultats obtinguts HYSYS a escala industrial.....	97
9.7.1. Composicions	97
9.7.2. Temperatures.....	98
9.7.3. Pressions.....	98
9.7.4. Cabals de líquid i Cabals de vapor.....	99
9.7.5. Resultats finals per la columna a escala industrial.....	100
9.8. Disseny de la columna destil·lació reactiva al laboratori.....	101
9.8.1. Canvi a escala laboratori	101
9.8.2. Característiques de la columna.....	101
9.8.3. Característiques del calderí.....	103
9.8.4. Característiques del condensador.....	106
9.8.5. Bombes.....	110
9.8.5.1. Bomba per l'àcid acètic.....	111
9.8.5.2. Bomba pel metanol.....	113
9.8.6. Canonades.....	115
9.8.7. Dipòsits	117
9.8.8. Circuit tancat per l'aigua que utilitzem en el calderí i el condensador.....	118
9.8.8.1. Bombes.....	118
9.8.8.2. Canonades.....	122
9.8.8.3. Dipòsits.....	123
9.8.9. Intercanviador de calor per l'àcid acètic.....	123
9.8.10. Controls en el procés.....	129
9.8.10.1. Reflux	129
9.8.10.2. Temperatura.....	129
9.8.10.3. Cabal.....	130
9.8.10.4. Nivell dels dipòsits.....	131
9.8.10.5. Pressió.....	131
9.8.11. Esquema general de la planta al laboratori	132
9.9. Resultats finals obtinguts pel HYSYS per la columna en el laboratori.....	133
9.9.1. Composicions.....	133
9.9.2. Temperatures.....	134
9.9.3. Pressions.....	134
9.9.4. Cabals de líquid i Cabals de vapor.....	134

9.9.5. Resultats final a escala laboratori	135
9.10. Materials i cost econòmic estimat d'implantació de la columna.....	136
9.10.1. Material i cost de la columna.....	136
9.10.2. Cost dels intercanviadors de calor.....	136
9.10.3. Cost de les bombes.....	137
9.10.4. Material i cost de les canonades.....	137
9.10.5. Material i cost dels dipòsits.....	138
9.10.6. Cost dels reactius	138
9.10.7. Cost total.....	139
10. Pràctica de laboratori: Produir Acetat de Metil a partir d' Àcid Acètic i Metanol en una columna de destil·lació reactiva.....	140
11. Conclusions.....	147
12. Bibliografia.....	148
13. Treball de futur	152
14. Apèndix.....	153
A. Fitxes de Seguretat pels reactius i productes de la reacció.....	153
B. Procediment a seguir per dur a terme una operació de destil·lació reactiva en el HYSYS.....	159
C. Plànol de la columna de plats.....	170
D. Plànols dels intercanviadors de calor de la planta.....	171
E. Corbes característiques d'una bombes centrífuga.....	172
F. Característiques del rebliment Katapak S	174
G. Característiques de l'acer AISI 316 i AISI 3104.....	176
H. Característiques generals d'un intercanviador de calor (Gunt Hamburg).....	178
I. Característiques generals d'una bomba centrífuga (Lowara).....	180
J. Propietats i característiques sobre el PEHD (Polietilè d'alta densitat)	181

ÍNDEX 2

Figura 1:	Gràfic de l'evolució de les patents i publicacions sobre la destil·lació reactiva.....	13
Figura 2:	Columna de destil·lació reactiva dividida en 3 seccions.....	16
Figura 3:	Columna de destil·lació + reactor extern amb una concentració d'inerts baixa....	17
Figura 4:	Columna de destil·lació + reactor extern amb una concentració d'inerts alta.....	18
Figura 5:	Columna de destil·lació on el calderí actua com a reactor.....	19
Figura 6:	Columna de destil·lació tota reactiva + calderí i condensador reactius.....	19
Figura 7:	Imatge dels Plats de “campana de barboteig”	20
Figura 8:	Imatge real de plats de “campana de barboteig”	21
Figura 9:	Imatge real dels plats perforats.....	22
Figura 10:	Imatge dels Plats de vàlvula.....	22
Figura 11:	Muntures de Berl.....	24
Figura 12:	Anells Rasching.....	25
Figura 13:	Anells Lessing.....	25
Figura 14:	Anells Pall.....	26
Figura 15:	Anells Pall.....	26
Figura 16:	Rebliment KatapakS.....	26
Figura 17:	Rebliment KatapaK pel laboratori.....	26
Figura 18:	Contacte entre els corrents vapor i líquid en columnes de plats amb etapes múltiples.....	28
Figura 19:	Contacte entre els corrents vapor i líquid en columnes de rebliment, mitjançant rebliment aleatori (anells Rasching) o amb rebliment estructural.....	29
Figura 20:	Com podem trobar els fluids en una columna de plats.....	29
Figura 21:	Catalitzador heterogeni amb estructura de porus esfèrics.....	30
Figura 22:	Catalitzador heterogeni amb estructura d'embolcalls cilíndrics.....	30
Figura 23:	Catalitzador heterogeni amb estructura metàl·lica.....	30
Figura 24:	Catalitzador heterogeni amb estructura de tubs horitzontals de malla metàl·lica.....	31
Figura 25:	Catalitzador heterogeni amb estructura de bosses.....	31
Figura 26:	Sandvitxos de catalitzadors estructurals: a) sandvitxos de catalitzadors plegats entre 2 llençols de gasa; b) els llençols de gasa estan units i cosits en quatre parts c) els elements del sandvitx col·locats en forma cúbica; d) els elements del sandvitx col·locats en cercle.....	32
Figura 27:	Rebliment com a activador catalític.....	32
Figura 28:	Rebliment estructural amb catalitzadors zeolítics.....	33
Figura 29:	Embolcall catalític.....	33

Figura 30:	Contacte entre el catalitzador i els corrents vapor i líquid en les columnes de plats.....	34
Figura 31:	Columnes amb rebliment catalític.....	34
Figura 32:	Plat p d'una columna de destil·lació.....	44
Figura 33:	Columna reactiva.....	48
Figura 34:	Estudiem un plat p de la columna de destil·lació reactiva.....	49
Figura 35:	Esquema senzill per un plat p.....	53
Figura 36:	Algoritme mètode Adams- Moultonn.....	55
Figura 37:	Exemple d'espectrografia d'una mescla de formaldehid + aigua + metanol.....	61
Figura 38:	Cel·la batch.....	62
Figura 39:	Cel·la de cabal.....	62
Figura 40:	Cel·la de recircul·lació.....	63
Figura 41:	Símbol HYSYS.Plant.....	64
Figura 42:	Foto de la icona de HYSYS.Plant.....	65
Figura 43:	Estudi d'un plat p en una columna de destil·lació.....	67
Figura 44:	Paràmetres a especificar en el HYSYS per una Reacció de Conversió.....	69
Figura 45:	Per una reacció d'equilibri on es calcula la K en funció de la temperatura.....	70
Figura 46:	Per una reacció d'equilibri on li dones un valor a la K fix.....	70
Figura 47:	Taula per una reacció d'equilibri on has d'especificar la T i la K.....	71
Figura 48:	Per una reacció d'equilibri on es calcula la K amb l'energia lliure de Gibbs.....	71
Figura 49:	Per una reacció cinètica on s'ha d'escollir el BASIS que s'especificarà pels components.....	73
Figura 50:	Per una reacció cinètica on es calcula la velocitat de reacció amb l'equació d'Arrhenius.....	74
Figura 51:	Taula que correspon al numerador de l'equació 8.21 per una reacció de catàlisi heterogènia per calcular la velocitat de la reacció.....	76
Figura 52:	Taula que correspon al denominador de l'equació 8.21 per una reacció de catàlisi heterogènia per calcular la velocitat de reacció.....	76
Figura 53:	Per una reacció simple on es calcula la velocitat de reacció amb l'equació d'Arrhenius.....	77
Figura 54:	Obtenció d'acetat de metil en una columna de destil·lació reactiva.....	78
Figura 55:	Obtenció d'acetat de metil amb el procés convencional.....	79
Figura 56:	Obtenció d'acetat de metil amb el reducció de diàmetre.....	79
Figura 57:	Gràfic de les dades d'equilibri corresponents a la Taula 8.....	83
Figura 58:	Gràfic de les dades d'equilibri corresponents a la Taula 8.....	83

Figura 59:	Columna Reactiva amb l'aliment en el mateix plat.....	90
Figura 60:	Taula on s'ha especificar el plat on entren els corrents d'alimentació.....	90
Figura 61:	Columna reactiva amb corrents laterals.....	91
Figura 62:	Taula a completar pels corrents laterals. On posa "Type" és on s'ha d'especificar en quin estat sortirà el corrent lateral.....	91
Figura 63:	Columna reactiva amb condensador parcial.....	92
Figura 64:	Dades a especificar quan el condensador és parcial.....	93
Figura 65:	Reactor + Columna de destil·lació.....	94
Figura 66:	Condicions d'operació i paràmetres de la columna reactiva dissenyada en el HYSYS.....	95
Figura 67:	La Columna de Destil·lació reactiva definitiva en el HYSYS a escala industrial.....	97
Figura 68:	Taula de composicions de cada component plat per plat.....	97
Figura 69:	Gràfic de les composicions de cada component plat per plat.....	97
Figura 70:	Taula de temperatures de la columna plat per plat.....	98
Figura 71:	Evolució de les temperatures plat per plat.....	98
Figura 72:	Evolució de la pressió plat per plat.....	98
Figura 73:	Taula de Cabals de vapor i Cabals de líquid plat per plat, juntament amb les temperatures i les pressions.....	99
Figura 74:	Columna Reactiva definitiva a escala laboratori amb resultats.....	100
Figura 75:	Valors de HETP aproximats.....	102
Figura 76:	Gràfic de la variació de temperatures en el calderí.....	104
Figura 77:	Gràfic de les variacions de temperatura en el condensador.....	108
Figura 78:	Esquema de la Planta amb canonades numerades.....	115
Figura 79:	Esquema circuit tancat per l'aigua.....	118
Figura 80:	Gràfic de la variació de temperatures en el IC per l'àcid Ac.....	125
Figura 81:	Regulador de reflux.....	129
Figura 82:	Esquema general de la planta al laboratori.....	132
Figura 83:	Columna definitiva a escala laboratori.....	133
Figura 84:	Taula de les composicions plat per plat.....	133
Figura 85:	Gràfic de les composicions plat per plat.....	133
Figura 86:	Taula de les temperatures plat per plat.....	134
Figura 87:	Gràfic de l'evolució de la temperatura en la columna.....	134
Figura 88:	Gràfic de l'evolució de la pressió en la columna.....	134

Figura 89:	Taula dels cabals de líquid i vapor juntament amb la temperatura i la pressió de treball.....	134
Figura 90:	Columna Reactiva a escala laboratori definitiva amb resultats.....	135
Figura 91:	Temporitzador que regula la raó de reflux.....	142
Figura 92:	Cromatògraf Perkin Elmer Clarus 500.....	143
Figura 93:	Imatge de la columna CPwax.....	144
Figura 94:	Imatge del vial encapsulat amb la xeringa de gasos.....	144

ÍNDEX 3

Taula 1:	Condicions amb les quals es veuen afavorides cada tipus de columna.....	20
Taula 2:	Aplicacions actuals en la indústria.....	37
Taula 3:	Possibles candidats d'aplicació industrial.....	41
Taula 4:	Equacions d'estat i models d'activitat del Fluid Package.....	65
Taula 5:	Tipus de reaccions que contempla el HYSYS.Plant.....	68
Taula 6:	Expressions de velocitat de reacció segons el mecanisme de reacció que empra el HYSYS.....	75
Taula 7:	Paràmetres físics i químics dels reactius i productes.....	81
Taula 8:	Dades d'equilibri per la mescla metanol - àcid acètic, pel component més volàtil, en el nostre cas el metanol.....	82
Taula 9:	Dades que es consideren per estudiar el cabal de l'aliment.....	84
Taula 10:	Resultats obtinguts en l'estudi del cabal.....	85
Taula 11:	Dades que es consideren per estudiar la temperatura de l'entrada de l'aliment...	85
Taula 12:	Resultats obtinguts quan es varia la temperatura de l'aliment.....	85
Taula 13:	Dades que es consideren per l'estudi dels plats.....	86
Taula 14:	Resultats per la variació del nombre de plats.....	86
Taula 15:	Resultats de l'estudi de plats considerant 35 plats totals.....	87
Taula 16:	Dades que es consideren per l'estudi de pressions en la columna.....	87
Taula 17:	Resultats que s'obtenen variant la pressió del calderí i el condensador.....	88
Taula 18:	Dades que es consideren per l'estudi del reflux.....	88
Taula 19:	Resultats de l'estudi de la variació de reflux.....	89
Taula 20:	Condicions de treball definitives per la columna reactiva en el HYSYS.....	89
Taula 21:	Resultats per l'aliment en un únic plat.....	90
Taula 22:	Resultats obtinguts amb corrents lateral.....	92
Taula 23:	Resultats amb corrents laterals, considerant que la naturalesa del corrent és líquid i que surt pel plat 13.....	92
Taula 24:	Resultats finals per corrents laterals.....	92
Taula 25:	Resultats amb condensador parcial determinant una variació de pressió fixa.....	93
Taula 26:	Resultats amb condensador parcial amb cabal fix.....	93
Taula 27:	Resultats finals quan es treballa amb condensador parcial.....	93
Taula 28:	Resultats per Reactor + Columna de destil·lació.....	94
Taula 29:	Característiques dels plats.....	95
Taula 30:	Dimensions del condensador.....	96
Taula 31:	Dimensions del calderí.....	96
Taula 32:	Característiques finals de la columna industrial.....	100
Taula 33:	Característiques i condicions de treball per la columna en el laboratori.....	101

Taula 34:	Característiques a trobar del fluid calent que entra al calderí.....	103
Taula 35:	Característiques finals dels fluids del calderí.....	104
Taula 36:	Característiques i condicions de treball pel calderí en el laboratori.....	106
Taula 37:	Propietats dels dos fluids que entren en el calderí escala laboratori.....	106
Taula 38:	Característiques a trobar pel fluid fred que entra al condensador.....	106
Taula 39:	Característiques finals dels fluids del condensador.....	108
Taula 40:	Característiques i condicions de treball pel condensador en el laboratori.....	109
Taula 41:	Propietats dels dos fluids que entren en el condensador escala laboratori.....	110
Taula 42:	Característiques de la bomba per l'àcid acètic.....	113
Taula 43:	Característiques de la bomba pel metanol.....	114
Taula 44:	Característiques de la bomba per l'aigua que entra al condensador.....	120
Taula 45:	Característiques de la bomba per l'aigua que entra en el calderí.....	122
Taula 46:	Característiques a trobar del fluid calent que entra a l'intercanviador de calor.....	123
Taula 47:	Característiques finals dels fluids de l'intercanviador de calor.....	124
Taula 48:	Característiques i condicions de treball per l' IC de l'àcid acètic.....	126
Taula 49:	Propietats dels dos fluids que entren en el calderí escala laboratori.....	126
Taula 50:	Característiques de la bomba per l'aigua calefactora.....	128
Taula 51:	Dimensions de la columna escala laboratori.....	135
Taula 52:	Valors estimats per la columna reactiva.....	136
Taula 53:	Valors estimats per l'intercanviador de calor de carcassa i tubs.....	136
Taula 54:	Valors estimats de les bombes centrífugues.....	137
Taula 55:	Valors estimats per les canonades de la planta.....	137
Taula 56:	Costos aproximats pels dipòsits.....	138
Taula 57:	Cost estimat dels reactius.....	138
Taula 58:	Cost estimat d'instal·lació de la planta.....	139
Taula 59:	Nivell i temperatura òptimes pels dipòsits de la instal·lació.....	141
Taula 60:	Sondes de temperatura.....	141

1. ANTECEDENTS

Encara que la destil·lació reactiva fa pocs anys que s'està començant a implantar a la indústria, el concepte no és nou. La primera referència que tenim sobre aquesta tècnica és l'any 1921 (Backhaus) en un procés d'esterificació amb catàlisi homogènia per produir acetat de metil. Però l'existència d'un desconegut azeòtrop va enrederir la seva implantació a nivell industrial fins l'any 1990 per Agreda, Partin i Heise en la indústria Eastman Chemical Co en Tennessee (EUA).

Des de l'any 1932 es treballava amb la catàlisi heterogènia, molts autors hi van treballar: Keyes (1932), Carney (1937), Leyes i Othmer (1945), Hoffman (1958). L'any 1971 Sennewald, Gerhrmann i Schafer van patentar la destil·lació reactiva amb catàlisi heterogènia per reaccions orgàniques.

A nivell industrial l'ús de la destil·lació reactiva es va demorar a causa de la seva complexitat. Una de les primeres aplicacions industrials amb èxit va ser l'esterificació de l'àcid acètic per produir acetat de metil en l'any 1984 per Agreda i Partin.

Moltes de les actuals aplicacions industrials van ser estudiades i dissenyades per Stichlmair i Frey l'any 1990 i Tuchlenski l'any 2001, per exemple:

- Esterificació del MTBE o del ETBE
- Esterificació del acetat de metil per produir acetat d'etil
- Alquilació del cumè per produir benzè
- Hidròlisi del etilenglicol per produir ter-amil alcohol

A nivell de laboratori també es duu a terme, ja que cada vegada s'empra més a la indústria i abans de porta-ho a escala industrial, cal verificar que el procés es pot realitzar en una columna reactiva i que s'obindrà un bon resultat. Però, el fet de poder-ho portar a escala industrial no és l'única finalitat, també hi ha columnes reactives a escala laboratori per tal d'estudiar en profunditat aquesta tècnica i així saber quins paràmetres, quina configuració, com, quan i què fa que millori o empitjori el resultat obtingut. Alguns d'aquests articles on es poden veure aquests estudis amb els seus respectius autors es troben detallats a la bibliografia.

En aquest gràfic es pot veure com van evolucionant els numero de patents i publicacions sobre la destil·lació reactiva a partir dels anys setanta.

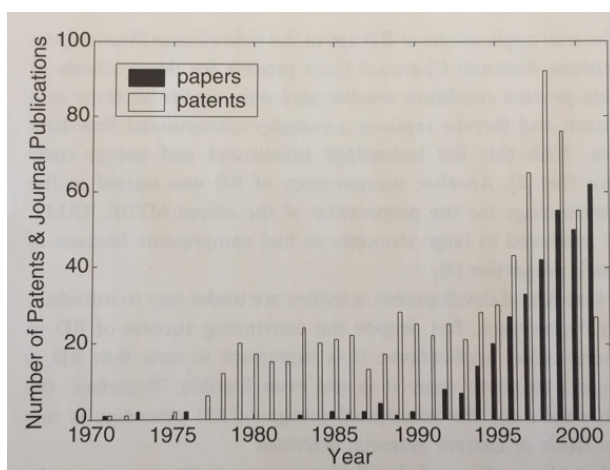


Figura 1: Gràfic de l'evolució de les patents i publicacions sobre la destil·lació reactiva
(Font: Sundmacher, K. Reactive distillation)

La idea de combinar la destil·lació amb la reacció és antiga, però la investigació, el desenvolupament i l'interès ha augmentat en els darrers anys.

Avui en dia, es fan molts estudis i avanços sobre la destil·lació reactiva, sobretot perquè es vol introduir cada cop més en la indústria ja que es poden obtenir molts beneficis.

Però malgrat l'èxit convincent en aplicacions com l'esterificació i eterificació, no sempre és avantatjós utilitzar aquesta tècnica. En alguns casos no és factible. Per tant, el desenvolupament d'eines fiables pel disseny conceptual dels processos que utilitzin la destil·lació reactiva és un dels camps més importants d'estudi i recerca actualment.

Degut a que la reacció i la destil·lació es produeix en la mateixa unitat, l'estat estacionari i el comportament dinàmic de la destil·lació reactiva poden ser molt complexos. Per tant, les estratègies adequades pel control de tots els processos han de ser els estudiades detingudament i en el moment que s'apliquin han d'assegurar la operació més òptima i segura. Aquest és un altre camí important per a la investigació i desenvolupament d'avui en dia.

En quant al tema docent, es troba a faltar documentació per aquesta temàtica en el laboratori. Molts dels articles que es troben sobre la destil·lació reactiva en el laboratori són sobre temes de simulació o investigació per millorar aquesta tècnica dins del món de la indústria.

2. OBJECTIUS

El nostre objectiu principal és implementar una pràctica docent al laboratori sobre destil·lació reactiva, així doncs, per poder-hi arribar s'han proposat uns apartats a seguir.

- Estudiar la destil·lació reactiva a escala industrial. Utilitzant el simulador HYSYS com a base, es farà un estudi d'una columna reactiva per una reacció en concret i es determinarà si aquesta reacció té sentit dur-la a terme al laboratori, si ens dona bones composicions en quan al destil·lat. També es determinarà la configuració i paràmetres que afavoreixen la reacció a la columna.
- Canvi a escala laboratori i seguidament procedir al disseny de la mateixa.
La nostra intenció és implantar una columna reactiva al laboratori, per tant es procedirà a canviar d'escala i fer l'estudi amb el simulador però amb les mesures, configuracions i paràmetres amb què es vol treballar al laboratori.
- Preparar una pràctica de destil·lació reactiva pels estudiants on es tracta de donar a conèixer aquesta tècnica als futurs estudiants d'enginyeria química.

3. INTRODUCCIÓ A LA DESTIL·LACIÓ REACTIVA

3.1 En què consisteix la destil·lació reactiva?

La destil·lació reactiva es considera una de les zones més àmplies dins de la temàtica de la separació amb reacció, la qual comprèn una o una combinació de reaccions químiques amb separació com podria ser, a part de la destil·lació, l'extracció, l'adsorció, l'absorció, la cristallització i la separació per membranes.

En les indústries de procés químic, la reacció química i la purificació dels productes desitjats per destil·lació es duen a terme normalment de forma seqüencial. En molts casos, el rendiment d'aquest procés químic clàssic pot ser millorat significativament per la integració de la reacció i la destil·lació en una sola unitat de procés de múltiples funcions. Aquesta integració és l'anomenada destil·lació reactiva. Aquesta operació combinada és destinada especialment a reaccions químiques on l'equilibri de la reacció limita la conversió en un reactor de llit fix a un nivell de baix a moderat. Així, per contínues separacions del producte de la reacció mentre està tenint lloc la reacció fa que s'obtingui un alt nivell de conversió. Existeixen un gran nombre de separacions que serien difícils de realitzar mitjançant la destil·lació convencional però que es poden realitzar amb èxit amb la destil·lació reactiva.

3.2 Configuracions possibles de la destil·lació reactiva

3.2.1 Columna de destil·lació amb reacció

La columna de destil·lació reactiva més usual és la que està dividida en tres parts seccions: la zona reactiva, que és on els reactius passen a productes, la zona de rectificació i la zona d'esgotament. En aquest tipus de columna es tracten normalment mesclures multicomponent. Les seccions de rectificació i esgotament tenen diferents tasques depenent dels punts d'ebullició dels reactius i productes. Si els productes tenen uns punts d'ebullició més baixos que els reactius, la secció de rectificació s'utilitza per purificar el producte i que els reactius no reaccionats es reciclin i la zona d'esgotament s'utilitza per eliminar o extreure de la columna els productes inerts i els productes secundaris, reciclant també els reactius que no hagin reaccionat. Si els productes són els que tenen els punts d'ebullició més alts, les tasques de les dues seccions són intercanviades.

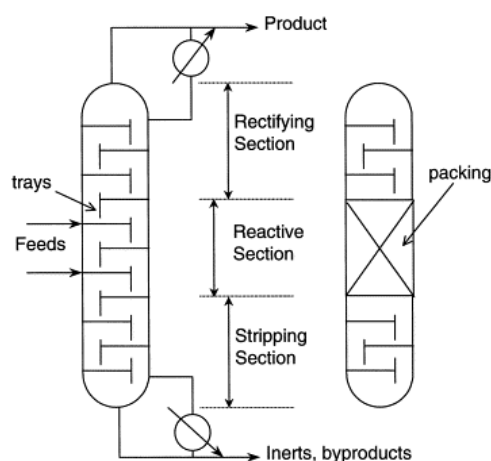


Figura 2: Columna de destil·lació reactiva dividida en 3 seccions
(Font: Estrada-Villagrana, A.D. *On the Modeling of Dynamics and Operation of Reactive Distillation*)

3.2.2 Columna de destil·lació amb un reactor extern i concentració d'inerts baixa

La configuració convencional per un procés de reacció química amb catalitzador sòlid implica dos passos, la reacció química i la separació. En el primer pas que té lloc la reacció química, els reactius entren en contacte amb el catalitzador sòlid a les condicions apropiades en un o més reactors. El corrent que surt del reactor va cap a una o més separacions on els reactius que no han reaccionat són separats dels productes de la reacció i els inerts. Els reactius sense reaccionar, en ocasions, són reciclats cap a la secció de la reacció.

La columna de destil·lació és alimentada pel producte B i reactiu A que no a reaccionat, el producte es va destil·lant mentre que el reactiu A amb una part de producte es recircula cap al reactor, ja sigui un tanc agitat en continu (CSTR) o un reactor de flux pistó (PFTR).

En aquesta configuració s'han de tenir en compte dos variables molt importants, la recirculació i el reflux de la columna de destil·lació.

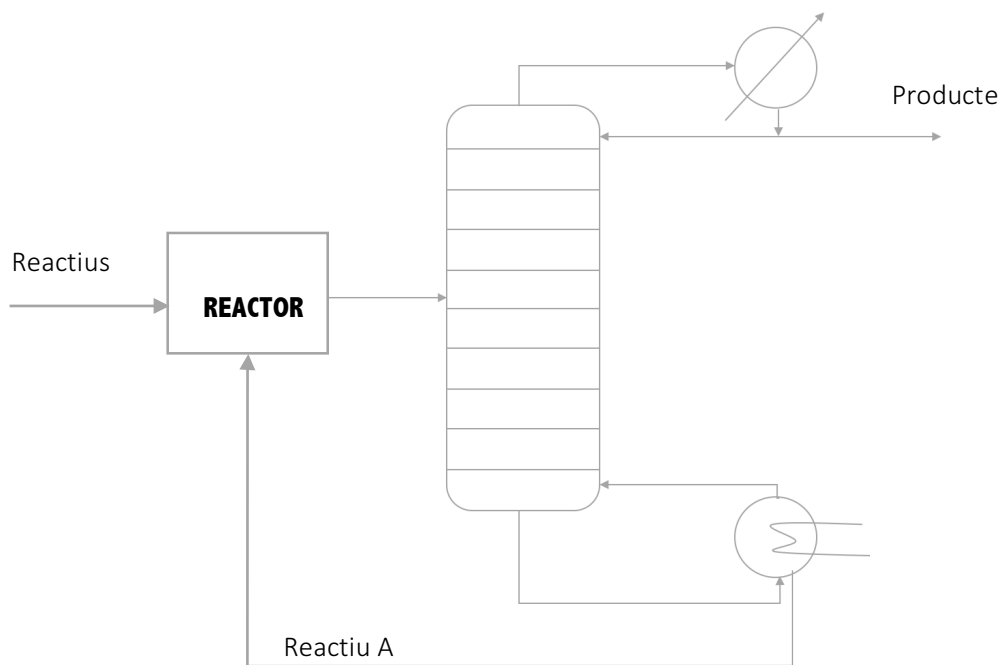


Figura 3: Columna de destil·lació + reactor extern amb una concentració d'inerts baixa
(Font: Elaboració pròpia)

3.2.3 Columna de destil·lació amb reactor extern i concentració d'inerts elevada

Quan una elevada quantitat d'inerts estan presents en el sistema són necessaris , almenys, dos passos de separació, un per separar el producte amb major puresa i un altre per separar els inerts. La configuració adequada és la que mostra la Figura 4.

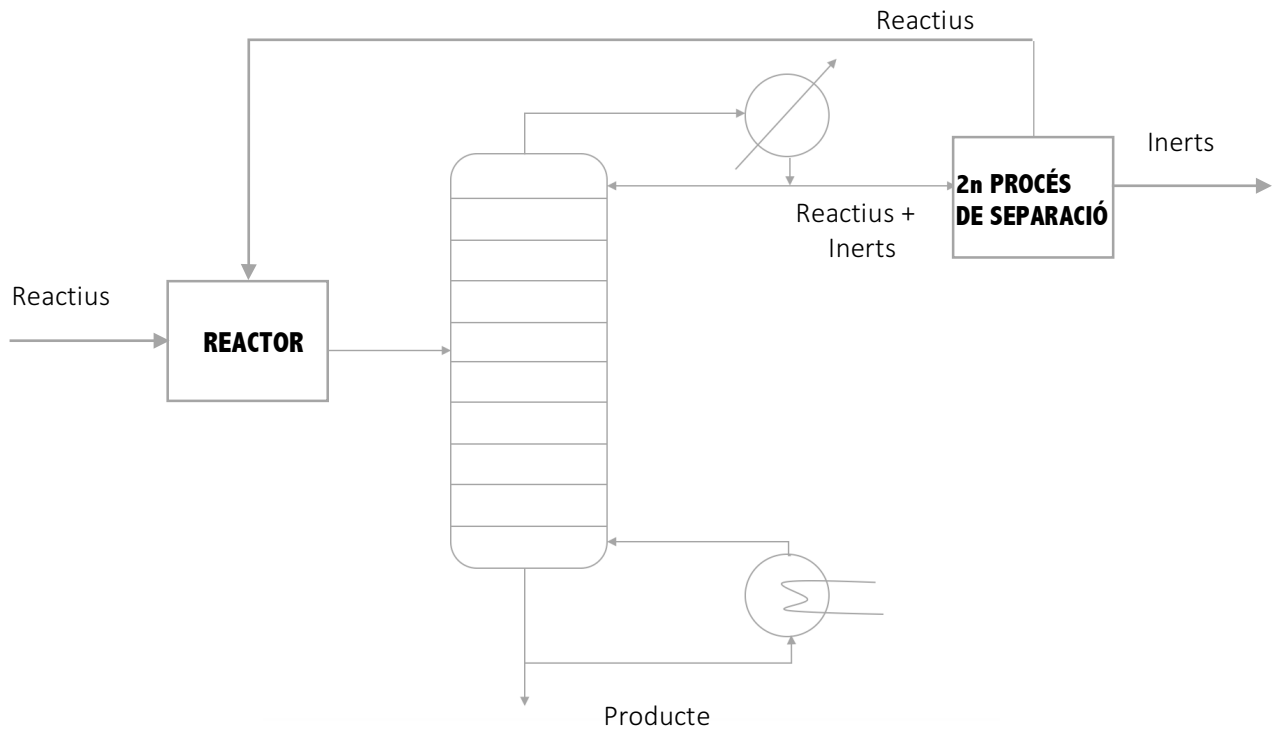


Figura 4: Columna de destil·lació + reactor extern amb una concentració d'inerts alta
(Font: Elaboració pròpia)

3.2.4 Columna de destil·lació amb calderí com a reactor

En aquesta configuració la reacció té lloc en el calderí de la columna, per tant és molt més simple que una columna reactiva, ja que en aquest cas la reacció té lloc en un únic plat. S'ha de tenir en compte el paràmetre de reflux de la columna.

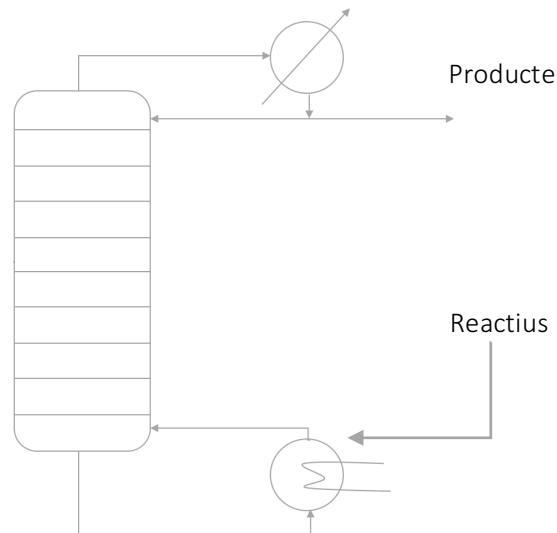


Figura 5: Columna de destil·lació on el calderí actua com a reactor
(Font: Elaboració pròpia)

3.2.5 Columna reactiva amb calderí i condensador, ambdós reactius.

En aquesta configuració, la reacció pot tenir lloc en qualsevol punt de la columna. L'aliment entra pel calderí, on es dona que la concentració de A és més elevada, així fa que la reacció es desplaci cap a la dreta, fent que $A \rightarrow B$ i millorant així, la conversió.

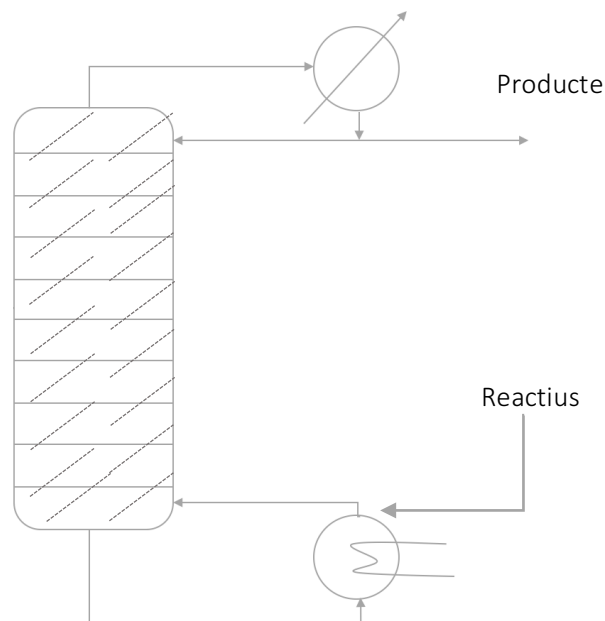


Figura 6: Columna de destil·lació tota reactiva + calderí i condensador reactius
(Font: Elaboració pròpia)

3.3 Tipus de columnes

Les columnes de destil·lació amb reacció, a l'igual que les columnes convencionals, poden classificar-se en dos grups, depenent de la configuració de les mateixes en columnes de plats i en columnes de rebliment.

El mecanisme utilitzat preferentment és el de plats, sobre els quals es retè el líquid que baixa perquè barbotei sobre el vapor. El sistema més senzill però, és el de rebliment, que omplen la torre i en la seva superfície és on té lloc el contacte del líquid que baixa amb el vapor que puja.

Les comparacions que s'obtenen entre els dos tipus de columnes són els següents:

- La diferència dels costos entre les columnes de plats i de rebliment no és gran, tot i que el rebliment és més car que els plats
- La diferència d'altura de la columna no és significativa si les velocitats de flux són tals que les eficàcies estan pròximes al seu valor màxim. Com a norma general, els plats s'acostumen a utilitzar quan les torres tenen un gran diàmetre i amb torres amb més de 20-30 etapes. Això és perquè en les torres de rebliment la eficiència disminueix quan més gran és el diàmetre de la columna, mentre que en les de plats passa lo contrari.
Les de rebliment es troben en el laboratori, plantes pilot, operacions d'alt buit i en operacions amb reaccions químiques altament corrosives, per exemple en les columnes d'absorció de gasos.

Taula 1: Condicions amb les quals es veuen afavorides cada tipus de columna

COLUMNES DE REBLIMENT	COLUMNES DE PLATS
Columnes amb diàmetre petit	Cargues variables de líquid i/o vapor
Medis corrosius	Treball amb pressions superiors a l'atmosfèrica
Destil·lacions crítiques al buit	Baixes velocitats del líquid
	Esforços tèrmics o mecànics
	Necessitat d'utilització de serpentins de refrigeració

3.3.1 Columnes de plats

En les torres de plats, el líquid descendeix per la torre per acció de la gravetat, mentre que el vapor ascendeix degut a la força de una lleugera diferencia de pressions de plat a plat. El vapor passa a través d'unes estructures en cada plat i entren en contacte amb el líquid que circula al llarg de cada plat.

Fins el 1950 els plats de "campana de barboteig" eren els únics dissenys que existien, més endavant van sorgir els plats perforats com els de Ripple, Turbogrid, Kitle, Venturi..., així com nombrosos plats de vàlvula.

- Plats de "campana de barboteig"

Han estat els més utilitzats al llarg de la història per tant hi ha de moltes formes i mides. Les campanes estan col·locades en els conductes de pujada.

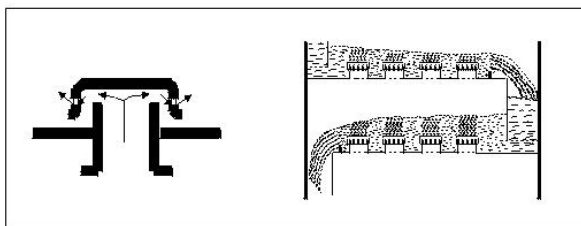


Figura 7: Imatge dels Plats de "campana de barboteig"
(Font: Lacova.upc.es)



Figura 8: Imatge real de plats de “campana de barboteig”
(Font: Lacova.upc.es)

Els avantatges que presenten aquest tipus de plat són:

- Si estan adequadament units a la torre, no tenen degoteig
- Hi ha una gran varietat de models i material publicat sobre ells
- Hi ha una gran experiència en la utilització d’aquest tipus de plats

Els desavantatges són:

- Canvis en la direcció del flux i múltiples expansions i compressions que donen lloc a elevades caigudes de pressió
- Les eficiències d’etapa són d’un 10 a un 20% inferiors que en els plats perforats o de vàlvula
- Comparant plat a plat, són un 25-50% més cars que els plats perforats i de un 10-30% més cars que els de vàlvula.

- Plats perforats

És el plat més senzill ja que la seva construcció és la més senzilla de totes. Són plaques amb perforacions i aquestes poden tenir diferents mides, de 3 a 13 mm. Que la mida de la perforació sigui més o menys gran depèn de l’embrutiment que pot patir. El diàmetre de la perforació serà major si la possibilitat d’embrutiment també ho és.

Els avantatges que presenta:

- És molt senzill la seva construcció i no és car
- Pots variar el diàmetre de les perforacions amb la finalitat d’ajustar-se a les variacions de flux

Per altre banda els desavantatges són:

- Segons el fluid que hi passi s’embruten bastant i la seva neteja no és fàcil
- Una gran àrea d’orificis contribueixen al degoteig
- Una àrea petita d’orificis, augmenta la estabilitat del plat però incrementa la possibilitat d’arrossegament i inundació i caiguda de pressió.

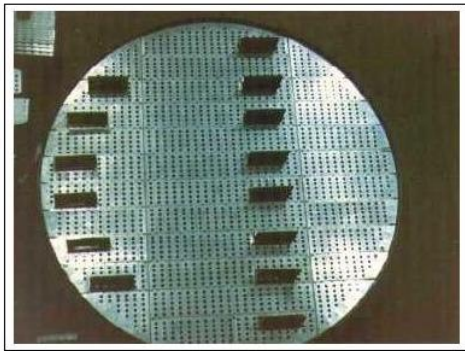


Figura 9: Imatge real dels plats perforats
(Font: Lacova.upc.es)

- Plats de vàlvula

Bàsicament els plats de vàlvula tenen tots els avantatges dels dos tipus de plats anteriors i difícilment algun dels inconvenients.

El disseny dels plats de vàlvula és similar als dels plats perforats, la principal diferència és la substitució dels orificis per vàlvules com portes d'entrada del gas. Així a velocitats altes, la vàlvula està completament oberta i a velocitats baixes o moderades, la vàlvula està parcialment tancada o tancada completament. D'aquesta manera, les vàlvules proporcionen una bona mescla entre el vapor i el líquid.

Els avantatges que presenten són:

- Tenen la mateixa capacitat, eficiència que els plats perforats
- Baixa caiguda de pressió
- Com els plats de barboteig, poden operar en un rang més ampli de condicions d'operació que els plats perforats
- La construcció és relativament simple i no és gaire més car que el plat perforat
- Poden treballar amb càrregues d'un 10% majors que els plats perforats i un 15-20% més que els de barboteig
- Tenen un gradient hidràulic pràcticament nul

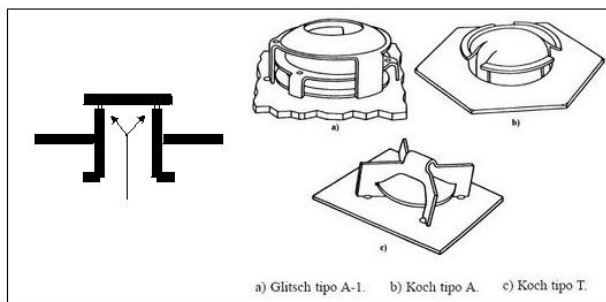


Figura 10: Imatge dels Plats de vàlvula
(Font: Lacova.upc.es)

Tot i que el més utilitzat és el plat perforat, degut a la seva facilitat de construcció i per tant a la seva economia, si es requereix major flexibilitat, llavors s'han d'utilitzar els altres tipus de plats. Els plats de barboteig s'acostumen a utilitzar per controlar el temps de residència òptim per tal de que es formi una determinada reacció química.

3.3.1.1 Eficiència dels plats

En una columna de plats amb múltiples etapes a contracorrent no sempre s'obtenen els resultats esperats quan s'utilitza un temps de residència i un íntim contacte suficient per aconseguir l'equilibri.

Per tant, les variacions de concentracions que tenen lloc en una determinada etapa són menors que les que s'obtingrien a partir de les condicions d'equilibri. Això, dit d'una altra manera seria el fet de que en la pràctica, els plats no es comporten de forma ideal, sinó que obtenim uns resultats inferiors als esperats. Aquesta relació entre el comportament ideal i real dels plats es coneix com l'eficàcia dels plats.

Es poden diferenciar tres tipus de eficàcia de plats:

- ┌ L'eficàcia Global: es refereix al total de la columna
- ├ L'eficàcia de Murphree: s'aplica un sol plat
- └ L'eficàcia local: es refereix a una localització específica d'un sol plat

- Eficàcia Global η_0

La seva utilització és molt senzilla, però és la que té menys fonament. Es defineix com la relació entre el número de plats que es necessiten en tota la columna i el seu número de plats reals.

$$\eta_0 = \frac{N^{\circ} \text{ plats teòrics}}{N^{\circ} \text{ plats reals}} \cdot 100$$

La eficàcia global no té en compte la variació d'eficàcia d'una etapa a una altra degut als canvis de les propietats físiques del sistema originats per variacions de composició i temperatura. A més les eficàcies d'un mateix plat poden variar per diferents compostos.

- Eficàcia de Murphree η_M

És una eficiència d'etapa que s'utilitza freqüentment per esbrinar el comportament d'un plat determinat per uns components donats.

La eficàcia de Murphree es defineix com la variació de la composició del vapor al passar d'un plat al següent, dividida per la variació que tindria en el vapor que surt si estigués en equilibri amb el líquid que surt del mateix plat.

$$\eta_M = \frac{y_n - y_{n+1}}{y_n^* - y_{n+1}} \cdot 100$$

on y_n és la concentració real del vapor que surt del plat n

y_{n+1} és la concentració real del vapor que entra en el plat n

y_n^* és la concentració del vapor en equilibri amb el líquid que surt del plat n

Aquesta eficàcia es pot utilitzar tant per la fase vapor com per la fase líquida, així també es pot definir la eficàcia de Murphree per la fase líquida.

- Eficàcia Local o Eficàcia Puntual de Murphree η_{PM}

Fa esment al càlcul de l'eficàcia en un sol plat però d'un punt en concret.

$$\eta_{PM} = \frac{y'_n - y'_{n+1}}{y_n^* - y'_{n+1}} \cdot 100$$

on y'_n és la concentració real del vapor que surt del plat n en un punt concret

y'_{n+1} és la concentració real del vapor que entra en el plat n en un punt concret

y_n^* és la concentració del vapor en equilibri amb el líquid que surt del plat n

Com l'eficàcia anterior, també es pot utilitzar tant per la fase vapor com per la fase líquida, així també es pot definir la eficàcia de puntual de Murphree per la fase líquida.

3.3.2 Columnes de rebliment

En les torres de rebliment es produeixen les mateixes condicions de contracorrent i de contacte entre líquid i vapor que en les torres de plats, però mitjançant un altre dispositiu diferent com és el rebliment. Aquest rebliment descansa sobre reixes metàl·liques que deixen que l'àrea de secció lliure sigui major. La torre de rebliment s'omple amb algun tipus de sòlids dividits, on la seva forma proporciona una gran àrea superficial. Aquest rebliment és mullat pel líquid que es reparteix uniformement sobre la seva superfície i va caient per la columna. En contracorrent amb aquest líquid ascendeix el vapor a través dels canals lliures no ocupats pel rebliment o pel líquid.

En una torre de rebliment, el vapor i el líquid estan contínuament en contacte i per tant es produeix intercanvi de matèria. No existeixen etapes discretes i identificables que proporcionin un equilibri líquid-vapor. És convenient que el recorregut de fases pel rebliment sigui relativament llarg, així podem suposar que el rebliment està completament mullat i per mitjà de la seva àrea obtindrem l'àrea de contacte entre fases.

Els cossos de rebliment de les torres no són col·locats a l'atzar i per això es fabriquen de diverses formes, els quals es disposen els uns als altres de tal manera que deixen petits forats entre ells. Per escollir un o altre tipus de rebliment s'han de valorar les següents característiques:

- Àrea de superfície per unitat de volum
- Material i cost
- Circulació i repartiment entre fases en la capa de rebliment
- Pèrdua de pressió en el vapor
- Resistència a la pressió i al xoc
- Possibilitats de neteja

Tenint en compte aquestes característiques tenim varis tipus de rebliment, cadascun amb característiques diferents que s'adeqüen segons les necessitats que puguis tenir depenent del procés que efectuïs en la columna.

Tenim:

- *Muntures de Berl*

Anteriorment, fins aproximadament l'any 1965 s'utilitzava aquest tipus de rebliment, es tracta de trossos de vidre o ceràmica trencats amb formes a l'atzar. El que passava es que mai dues torres es comportaven igual encara que portessin el mateix rebliment ja que els trossos mai eren igual, ni amb mida ni amb forma.



Figura 11: Muntures de Berl
(Font: Rtvpe.com)

- *Anells Rasching*

Després de les muntures de Berl es van introduir els anells Rasching, anells que es poden fer dels molts materials com poden ser: metalls tous o mal·leables, porcellana, pedra artificial, vidre, carboni, cautxú.. i compleixen la característica que el seu diàmetre és igual a la longitud.



Figura 12: Anells Rasching
(Font: Sulzer.es)

- *Anells Lessing*

Com els anells de Raschig amb la diferència a l'interior de l'anell es troba dividit amb dues o més parts augmentant així l'àrea de contacte.

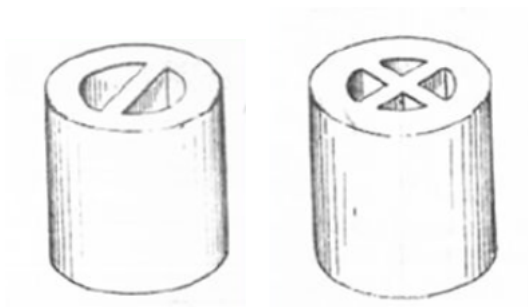


Figura 13: Anells Lessing
(Font: Rtvpe.vom)

- *Anells Prym*

Aquests anells es diferencien dels Raschig pels acabats en les vores de l'anell i perquè aquest només es pot fer de metall.

- *Anells de Pall*

Aquests anells es caracteritzen perquè tenen una gran resistència mecànica, que proporcionen un elevat nombre de passos pel líquid i que tenen acabats irregulars o tenen orificis o protuberàncies. Aquests són un dels més utilitzats ja que els podem trobar de molts materials i donen bons resultats.



Figura 14: Anells Pall
(Font: Rtvpe.com)



Figura 15: Anells Pall
(Font: Sulzer.es)

Evidentment, fora d'aquests tipus de rebliment, que podríem dir que són els més coneguts, hi ha molts més tipus i cadascun amb característiques diferents per proporcionar les millor condicions de treball. Les empreses que es dediquen en el món de la química investiguen i desenvolupen contínuament diferents rebliments i anells per millorar les condicions de treball de la columna.

Hi ha un tipus de rebliment que és específic per destil·lació amb reacció, és l'anomenat Katapak S. Aquest rebliment és de la casa Sulzer. Es pot dissenyar amb mides industrials o amb mides petites, per columnes de laboratori.

Katapak-SP For reactive distillation

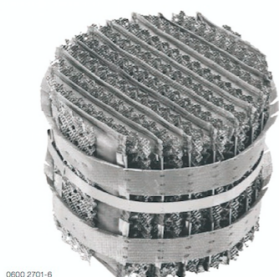


Figura 16: Rebliment KatapakS
(Font: Sulzer.es)

Laboratory packing For small laboratory columns



Figura 17: Rebliment KatapaK pel laboratori
(Font: Sulzer.es)

3.3.2.1 Eficiència d'una columna de rebliment

L'eficàcia d'una columna de rebliment (Z) ve expressada a partir de l'altura del rebliment (AUT) que fa falta per dur a terme la transferència de matèria i el nombre d'unitats de transferència (NUT).

Per tant, es pot expressar com:

$$Z = (AUT) \cdot (NUT)$$

on:

AUT: és l'altura d'una unitat de transferència (m)

NUT: Nombre d'unitats de transferència

Per tal de calcular l'altura d'una unitat de transferència es pot fer mitjançant l'equació següent:

$$AUT = \frac{L'}{K_x \cdot a \cdot S} \rightarrow \text{pel corrent líquid}$$

$$AUT = \frac{G'}{K_y \cdot a \cdot S} \rightarrow \text{pel corrent gasós}$$

on $(K_x \cdot a)$ i $(K_y \cdot a)$ són els coeficients globals d'absorció (mols/s·m³)

S és la secció transversal de la columna (m²)

Per tal de calcular el nombre d'unitats de transferència es pot fer mitjançant l'expressió següent:

$$NUT = \int_{x_1}^{x_0} \frac{dx}{x^* - x} = \int_{y_1}^{y_0} \frac{dy}{y^* - y}$$

Si s'integra l'expressió anterior s'obté:

$$NUT = \frac{Y_0 - Y_1}{\frac{(Y_0 - Y_0^*) - (Y_1 - Y_1^*)}{\ln \left(\frac{Y_0 - Y_0^*}{Y_1 - Y_1^*} \right)}}$$

3.3.2.2 Altura equivalent d'un plat teòric

Mitjançant l'altura equivalent d'un plat teòric (HEPT), es pot fer una comparació en una columna de rebliment i una de plats. A partir d'aquesta dada, es pot determinar quina és l'alçada del rebliment mitjançant el nombre de plats teòrics. Aquesta magnitud es pot determinar per la següent equació:

$$HEPT = \frac{Z}{N}$$

on:

Z és l'altura del rebliment

N és el número de plats teòrics

3.4 Tipus d'equips en els quals té lloc la destil·lació amb reacció

La reacció que es produeix dins de la columna pot estar catalitzada o no. Si ho està, les reaccions que es produeixen poden ser de dos tipus: homogènies o heterogènies.

Diem que la reacció és homogènia quan el catalitzador està en la mateixa fase que els reactius. En aquest tipus de reaccions la velocitat de reacció es veu afectada quan es canvien les concentracions del catalitzador. Així, la velocitat de reacció es pot adaptar, dins d'un gran interval, a les condicions que necessiti l'equipament de la columna. Necessita però, un pas de separació addicional per recuperar el catalitzador i reciclar-lo.

Es parla de catàlisi heterogènia quan el catalitzador es troba en una fase diferent als reactius. Aquest tipus de reaccions requereixen una estructura per fixar el catalitzador a la zona de reacció. Això pot ser unes de les causes dels problemes de disseny i operació de la columna, ja que és un factor que limita la concentració de catalitzador, la qual podria ser més elevada. La velocitat de reacció es veu limitada pel límit establert de la concentració de catalitzador. També es podria pensar en millorar aquesta velocitat, augmentant la temperatura o la pressió, però en la catàlisi intervenen partícules d'intercanvi d'ions i aquestes també tenen un rang de treball limitat, en quan a la temperatura i pressió.

Pel disseny de columnes de destil·lació reactiva es requereix informació detallada sobre la hidrodinàmica i la transferència de massa, però aquesta informació manca sovint. Les eines modernes de simulació de dinàmica de fluids poden ser de gran ajuda.

Els equips habituals són de plats i de rebliment però poden tenir connotacions diferents en alguns casos.

3.4.1 Equip per una destil·lació amb reacció homogènia

En les primeres columnes de destil·lació amb reacció considerades la reacció tenia lloc en fase líquida sense la utilització d'un catalitzador sòlid. Processos de destil·lació amb reacció homogenis podien ser aconseguits en una columna amb múltiples plats mitjançant el contacte entre el corrent vapor i el corrent líquid o en una columna amb rebliment aleatori o estructural. El rebliment en aquest cas és inert (no reactiu i amb propietats no catalítiques) i serveix únicament per proveir la distribució líquida en la columna. Des del punt de vista d'incrementar la productivitat de la columna de destil·lació amb reacció, és important maximitzar el manteniment del líquid dins la columna. Les columnes de rebliment normalment mantenen menys el líquid que les columnes de plats, per tant per columnes de destil·lació amb reacció homogènies, són preferibles columnes de plats.

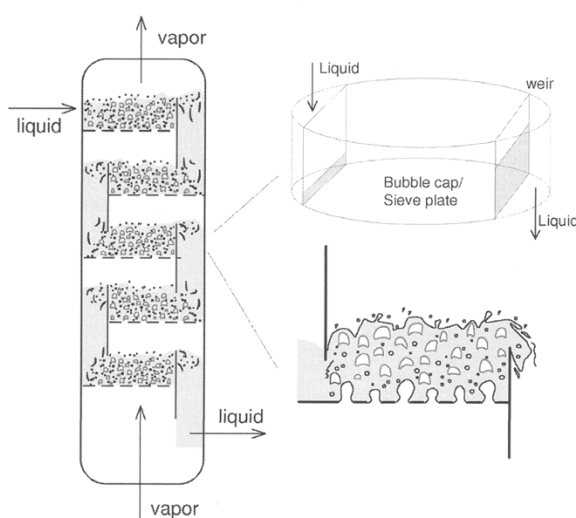


Figura 18: Contacte entre els corrents vapor i líquid en columnes de plats amb etapes múltiples
(Font: Sundmacher, K. Reactive distillation)

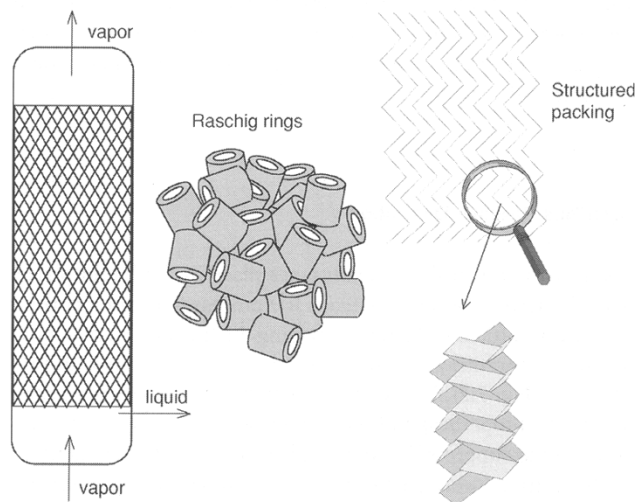


Figura 19: Contacte entre els corrents vapor i líquid en columnes de rebliment, mitjançant rebliment aleatori (anells Raschig) o amb rebliment estructural (Sulzer BX)
(Font: Sundmacher, K. Reactive distillation)

Ens trobem que en una columna de plats poden els fluids poden estar pulveritzats, barrejats amb espuma, o amb un flux espumós, com es pot veure en la figura següent:

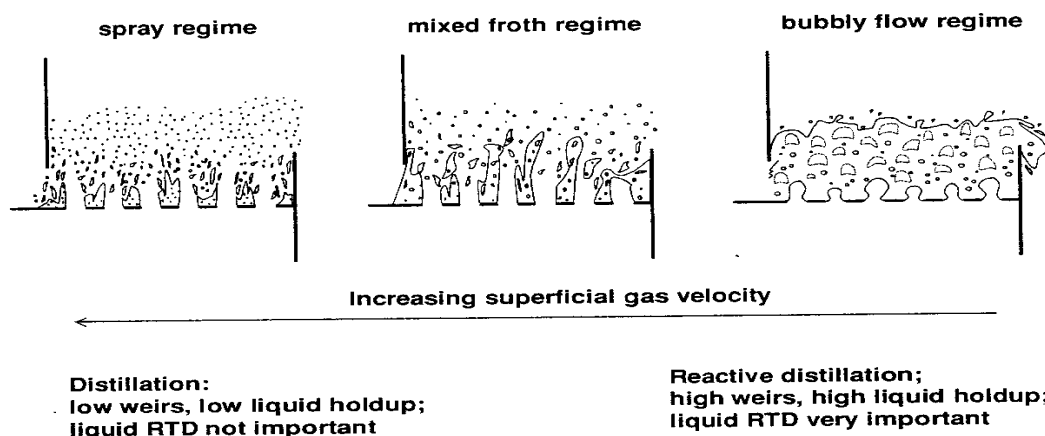


Figura 20: Com podem trobar els fluids en una columna de plats
(Font: Sundmacher, K. Reactive distillation)

Les columnes de destil·lació convencionals normalment operen a unes velocitats de vapor elevades en el pulveritzador o en el règim barrejat amb espuma. Això és degut al desig d'incrementar la alimentació en la columna i a incrementar l'àrea interfacial del vapor i del líquid. No hi ha la necessitat d'aconseguir un manteniment màxim del líquid en la destil·lació convencional.

En canvi, la situació amb respecte a la destil·lació amb reacció és una mica diferent. La reacció té lloc a la fase líquida i aquest permet que la reacció química es dugui a terme en un espai més gran. Això s'hauria d'aconseguir mitjançant un elevat manteniment del líquid i un temps de residència de la fase líquida. A pesar de que el règim preferent d'operació és un règim barrejat amb espuma, aquest és portat a terme a unes baixes velocitats superficials de vapor llavors la tria d'un recipient elevat assegura un alt manteniment del líquid en els plats. Els plats amb espuma són apropiats per columnes de destil·lació amb reacció, perquè tenen una elevada capacitat de mantenir el líquid que tamisa els plats.

3.4.2 Equip per una destil·lació amb reacció heterogènia

Per processos catalitzats heterogèniament, el disseny de l'equip posiciona un canvi considerable. Les mides de les partícules del catalitzador utilitzades en algunes operacions estan normalment a dins del marge de 1-3 mm. Si les partícules són més grans permeten una difusió de les limitacions interparticulars. Per superar aquestes limitacions d'inundació, les partícules del catalitzador tenen que ser recobertes a dins d'una tela metàl·lica. La majoria dels catalitzadors recoberts romanen col·locats a dintre de la columna.

Aquestes estructures poden ser:

- Porus esfèrics omplerts amb catalitzadors

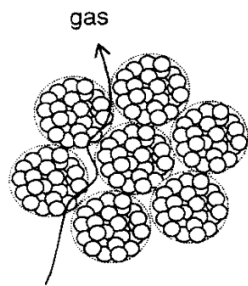


Figura 21: Catalitzador heterogeni amb estructura de porus esfèrics
(Font: Sundmacher, K. Reactive distillation)

- Embolcalls cilíndrics

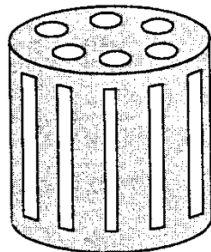


Figura 22: Catalitzador heterogeni amb estructura d'embolcalls cilíndrics
(Font: Sundmacher, K. Reactive distillation)

- La tela metàl·lica de diferents formes (en aquest cas esfèrica)

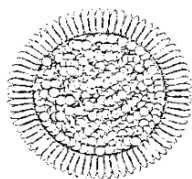


Figura 23: Catalitzador heterogeni amb estructura metàl·lica
(Font: Sundmacher, K. Reactive distillation)

En diverses configuracions les partícules del catalitzador necessiten estar embolcallades en un rebliment de gasa. Per exemple:

- Disposició horitzontal dels tubs de malla metàl·lica contenint catalitzador

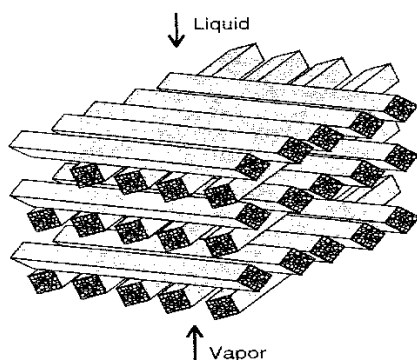


Figura 24: Catalitzador heterogeni amb estructura de tubs horitzontals de malla metàl·lica
(Font: Sundmacher, K. Reactive distillation)

- Les partícules agrupades en bosses de roba en forma de bales.

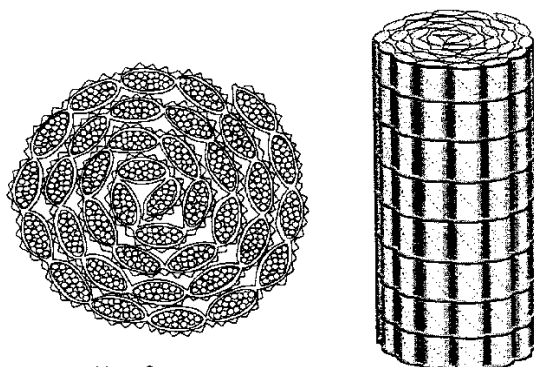


Figura 25: Catalitzador heterogeni amb estructura de bosses
(Font: Sundmacher, K. Reactive distillation)

- Les partícules de catalitzador plegats dins d'una tela metàl·lica

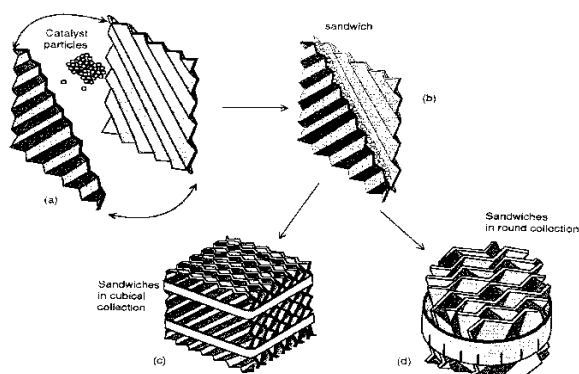


Figura 26: Sandvitxos de catalitzadors estructurals: **a)** sandvitxos de catalitzadors plegats entre 2 llençols de gasa; **b)** els llençols de gasa estan units i cosits en quatre parts; **c)** els elements del sandvitx col·locats en forma cúbica; **d)** els elements del sandvitx col·locats en cercle.

(Font: Sundmacher, K. Reactive distillation)

També es possible convertir el rebliment en un activador catalític.

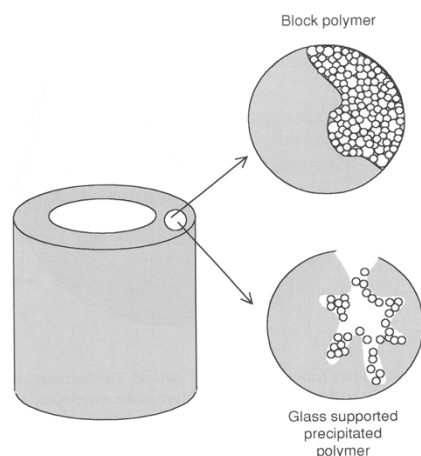


Figura 27: Rebliment com a activador catalític

(Font: Sundmacher, K. Reactive distillation)

Una altra possibilitat és vestir el rebliment estructural amb catalitzadors zeolítics (Imatge 24a) o bé el catalitzador pot estar fos en forma monolítica i es pot utilitzar per contacte no comú entre els corrents líquid i vapor, on s'ha desenvolupat una construcció monolítica consistent en tubs altejats com es pot veure a la següent (Imatge24b).

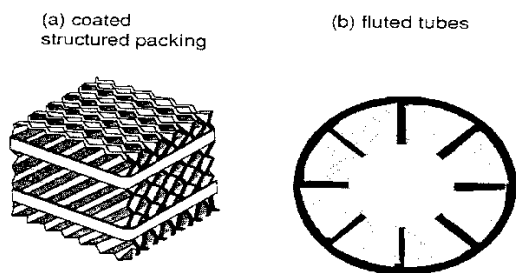


Figura 28: Rebliment estructural amb catalitzadors zeolítics
(Font: Sundmacher, K. *Reactive distillation*)

El concepte de vestir el rebliment estructural amb catalitzadors zeolítics no ha estat posat en pràctica per diferents raons:

- La quantitat de catalitzador que pot ser processat en una columna és petita comparada amb l'addició de pastilles de catalitzador o catalitzadors homogenis.
- El revestiment o la impregnació de materials catalítics en superfícies metàl·liques és car.
- La producció de materials catalítics per donar forma al rebliment per la destil·lació és també car.
- Hi ha un mètode de fabricació no genèric que pot produir diferents materials catalítics com a revestiments o rebliments estructurals econòmics.

L'embolcall catalític es pot ubicar en diverses zones de la columna reactiva.

- El catalitzador s'ubica dins d'un embolcall per on hi travessa el líquid

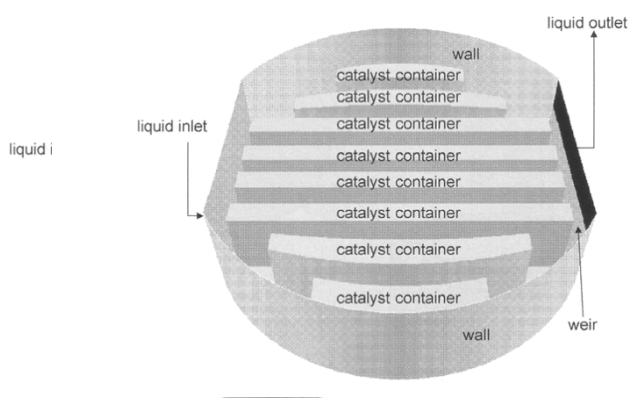


Figura 29: Embolcall catalític
(Font: Sundmacher, K. *Reactive distillation*)

Aquests embolcalls estan també completament submergits en l'espuma del plat, per assegurar un bon contacte entre el líquid i el catalitzador.

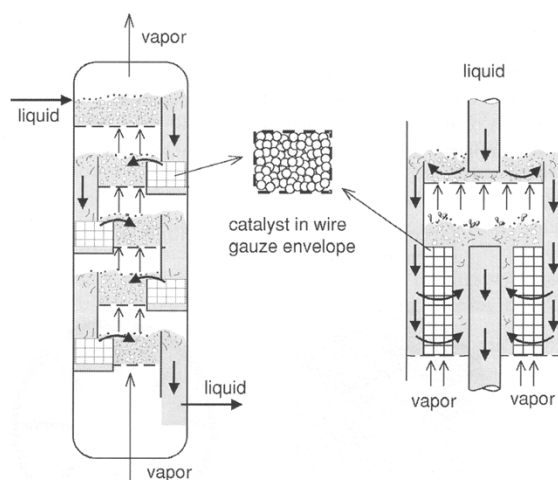


Figura 30: Contacte entre el catalitzador i els corrents vapor i líquid en les columnes de plats
(Font: Sundmacher, K. Reactive distillation)

- Columna de plats amb rebliment catalític

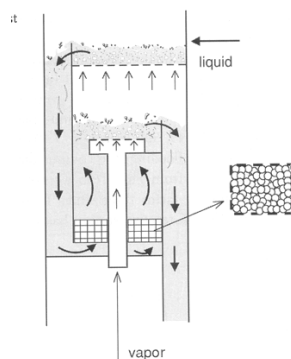


Figura 31: Columnes amb rebliment catalític
(Font: Sundmacher, K. Reactive distillation)

Com es pot veure en la Figura 31, el flux de vapor circula a través de la secció amb rebliment d'una xemeneia central sense contacte amb el catalitzador en canvi el líquid a partir dels plats de separació és distribuït planament a dins de la secció reactiva amb rebliment.

3.5 Avantatges i inconvenients de la destil·lació reactiva

Cada reacció química té un equilibri de reacció. La composició química en l'equilibri és aquella que la Energia Lliure de Gibbs és la mínima a una determinada temperatura. Hi ha algunes reaccions químiques catalitzades per un catalitzador sòlid que, a una determinada temperatura, la mescla de la reacció en l'equilibri químic encara té elevades concentracions de un o de més reactants de la reacció, aquesta continua sense arribar a consumir completament el reactant que és estequiomètricament limitant. Aquestes són les reaccions amb un equilibri limitat.

Per aquestes reaccions químiques, la conversió pot ser incrementada substancialment per una contínua eliminació de la mescla que ja ha reaccionat a mida que es va obtenint. És a dir, d'aquesta forma desplaçem l'equilibri en la direcció apropiada per obtenir una millor conversió. I aquí és on entra el paper de la destil·lació amb reacció.

També algunes reaccions químiques tenen un significant calor de reacció ΔH i poden ser exotèrmiques o endotèrmiques. En un reactor adiabàtic, això provoca un marcat canvi en la temperatura de la mescla de la reacció a mesura que la reacció progressa. Aquest canvi considerable de temperatura provocarà un desfavorable equilibri de la reacció, disminució de la conversió i una reducció en la selectivitat de la mateixa, a més pot afectar a l'estabilitat del catalitzador.

Per aquestes reaccions químiques, el disseny del reactor convencional ha de incloure la divisió del mateix en etapes que continguin refrigerants intermedis en el cas de les reaccions exotèrmiques o calderins per les reaccions endotèrmiques, és a dir, s'han d'afegir al procés una sèrie d'intercanviadors de calor que encareixen el procés i per tant produeix un encariment del capital de l'equipament. En canvi, amb una columna de destil·lació reactiva, la calor de reacció no afectarà a l'equilibri de la reacció. Això es degut a que, en qualsevol punt proper a la catàlisi, el calor de reacció causa una transferència de massa addicional (vaporització o condensació) entre fases de vapor i líquid i que per sobre i per sota de la transferència de massa només està tenint lloc la destil·lació, sense reacció. Això és gràcies a que la temperatura de la fase on té lloc la reacció és la temperatura bombolla aquella que és uniforme i constant en tota la secció on s'està produint la reacció. Així que si la reacció és exotèrmica, aquesta calor és utilitzada directament per la destil·lació.

Un altre punt important a tenir en compte és la influència del catalitzador que s'utilitza per la reacció. Les reaccions adequades per realitzar-se mitjançant la columna de destil·lació amb reacció són aquelles que la temperatura del catalitzador coincideixi amb la temperatura que opera la columna.

Per tant, la combinació de la reacció i la destil·lació en una unitat ha agafat embranzida aquests darrers anys en el món industrial gràcies als seus avantatges respecte la destil·lació convencional.

Els avantatges són:

- Incrementa el rendiment a causa de la superació de les limitacions termodinàmiques i químiques
- Incrementa la selectivitat ja que suprimeix totes o moltes de les reaccions secundàries o reaccions no desitjades
- En el cas de les reaccions exotèrmiques es redueix la consumició d'energia gràcies a que s'aprofita la calor de reacció
- Evita la formació de punts calents gràcies a la evaporació simultània del líquid
- Es possible separar components amb punts d'ebullició molt propers
- En possible separar mescles que formen azeotrop ja que simplifica en gran mesura el comportament d'equilibri de fase.
- Simplificació dels processos d'integració

- Minimització de l'impacte ambiental
- Flexibilitat en la fabricació de molts productes utilitzant el mateix equipament
- El catalitzador retingut en el reactor evita la necessitat de ser separat dels productes

Tots aquests avantatges fan possible l'augment de l'eficàcia del procés i que la inversió inicial i els costos d'operació siguin molt menors, un tema sempre interessant a contemplar.

Malgrat tot això, la destil·lació reactiva té algunes restriccions que fa que no es pugui aplicar encara que sigui una operació molt atractiva:

- Rang d'operació comú, en quan a temperatura i pressió, per la reacció i la destil·lació, i no sempre coincidiran en les condicions òptimes de treball
- Dificultats per proporcionar el temps de residència adequats
- La seqüència de punt d'ebullició apropiada: els productes clau haurien de tenir el punts d'ebullició més alt o més baix i els productes no desitjats obtinguts de les reaccions secundaries haurien de tenir un punt d'ebullició mig
- La presència de reaccions en la columna altera moltes vegades l'equilibri líquid-vapor esperat
- Si el catalitzador és líquid altera l'equilibri líquid- vapor. Si el catalitzador és àcid s'ha de tenir en compte la corrosió
- Els productes secundaris o components inerts poden complicar la separació

4. APLICACIONS INDUSTRIALS

El concepte de combinar aquestes dues funcions importants en el món de la enginyeria no és nou en el món industrial.

La majoria de les aplicacions més importants en la indústria són en el camp dels processos d'esterificació i eterificació.

Avui en dia, es fan molts estudis i avanços sobre la destil·lació reactiva i sobretot per començar a introduir aquest tipus de destil·lació en tots els processos químics.

A continuació hi ha dues taules on en la primera es mostren algunes de les aplicacions de la destil·lació reactiva que ja s'empren actualment en la indústria i en la segona es mostren les reaccions candidates a que es duguin a terme en una columna reactiva.

Taula 2: Aplicacions actuals en la indústria

Reacció	Catalitzador/ Revestiment de la columna/ ...	Observacions sobre els motius del seu ús i/o èxits
Eterificació		
Metanol + isobutè = MTBE	Amberlyst-15	Millorar la conversió del isobutè i aconseguir la separació si el isobutè prové de les fraccions C4
Metanol + isoamilè = TAME	Resina iònica	Millorar la conversió del isoamilè
(Bio) Etanol + terbutilalcohol = ETBE + Aigua	Amberlyst-15	Sobrepasar la conversió d'equilibri i així fomentar la utilització del bioetanol
Isopropanol + propilè = DIPE	Zeolita	Un procés de dues etapes que utilitza aigua i propilè com aliment
Esterificació amb alcohols/olefines		
Àcid acètic + metanol = acetat de metil + Aigua	Dowex 50 W X-8 Àcid sulfúric	Recuperar l'àcid acètic de corrents diluïts (30-60% w/w) Recuperar l'àcid acètic diluït en el procés de carbonilació i millorar la conversió fins a un >99% (es forma un azeotrop)
	Amberlyst- 15	Recuperar l'àcid acètic de corrents diluïts (2,5-10% w/w)
Butanol + àcid acètic = acetat de butil + Aigua	Resina catiònica	Recuperar l'àcid acètic de corrents aquosos diluïts
2- metil propanol + àcid acètic = 2- metil propil acetat + àcid làctic = metil lactat + aigua	Dowex 50	Recuperar l'àcid làctic provinent de la fermentació
	Katapax - S	Fabricar el 2- metil propil acetat
Àcid mirístic + isopropanol = isopropil miristat + aigua		Per recuperar l'àcid mirístic
Compostos sililats + àcid sulfúric = ester d'àcid sulfúric sililat	No reactiu	Recuperar els compostos sililats dels processos farmacèutics

Síntesis del vinil acetat

Acetaldehid + anhídrid acètic = acetat de vinil

Millorar el procés en quan a seguretat i augmentar el rendiment

Transesterificació

Dialquil carbonat + fenol/etanol = diaril carbonat + alcohol

Compostos de plom o zeolita
Fenol com a agent extractor

Alternativa pel procés convencional que s'utilitza fosc i millora el rendiment ja que es pot s'obté una recuperació més efectiva de l'alcohol

Hidròlisis

Acetat de metil + aigua = metanol + àcid acètic

Resines iòniques

Recuperar l'àcid acètic i el metanol en la producció de polivinil alcohol (PVA) i en la producció d'àcid tereftàlic (PTA)

Acrilonitril → Acrilamida

Catalitzador de òxid de coure

Redueix la formació de productes secundaris

Acetalització

Metanol + formaldehid aquós = metilal + aigua

Resines iòniques

Sobrepasar la conversió d'equilibri
Treure el formaldehid com a impuresa

Etanol + formaldehid aquós = etilal + aigua

Resines iòniques

Recuperar el formaldehid

Etilenglicol + formaldehid = acetal

Resines iòniques

Recuperar el formaldehid

Condensació d'aldols + deshidratació

Acetona = diacetona alcohol (DAA)+ òxid de mesitilè

Resina aniònica

Selectivitat molt alta cap a DAA i millora la conversió

Butiraldehid → 2 – etil hexanal

Solució aquosa alcalina

S'evita la formació de trímers i /o tetràmers de l'aldehid

Hidratació / deshidratació

Òxid d'etilè + aigua = etilenglicol

Resina iònica

Millora la selectivitat cap al MEG i evita la formació de dietilenglicol (DEG).
S'assoleix un millor control de temperatura de la reacció exotèrmica

Isobutè + aigua = terbutilalcohol

Resina catiònica

Superar les limitacions d'equilibri

Hidratació del propilè a isopropanol

Resina catiònica

Superar les limitacions d'equilibri

Hidratació de l'isoamilè a teramilalcohol

Amberlyst - 15

Millorar el rendiment i la selectivitat

Hidratació de ciclohexè a ciclohexanol

Òxid de silici o òxid de gal·li

Sobrepasar la conversió d'equilibri

Alquilació/Transalquilació/Desalquilació		
Benzè + propilè = cumè	Union Carbide LZY – 82 Procés amb catalitzador en suspensió	Millor puresa del cumè Adequat quan es treballa amb solucions de benzè diluïdes
Benzè + etilè/propilè = alquil benzè	Zeolita	Adequat quan es treballa amb solucions de benzè diluïdes
Alquilació del aromàtics amb olefines (C4 - C15) i desalquilació del producte alquilat	Tamisos moleculars	El producte obtingut és considerat el millor per fer l' octanatge de la gasolina Es fa una isomerització indirecta de les olefines
Isomerització		
2-Butè → 1- Butè	Alúmina amb un suport de pal·ladi	Millorar la conversió
1- Butè → 2- Butè	Catalitzador d'hidrogenació estàndard	Separar l'isobutilè dels corrents C4
n-parafines → iso-parafines	Catalitzador d'alúmina clorada amb presència d'hidrogen	Augmenta el valor en quan l'octanatge de la parafina
Cloració		
Diclorobenzè → Triclorobenzè	-	Augmenta la selectivitat cap a la formació de tricolorbenzè
Hidrogenació/Hidrodesulfuració/Deshidrogenació		
Hidrogenació de l'alquil antraquinona	-	Formació de peròxid d'hidrogen
Hidrogenació de benzè a ciclohexà	Alúmina amb suport d'un catalitzador de níquel	Evita la formació de metil ciclopentà i s'elimina el benzè del reformat lleuger
Hidrodesulfuració del gasoil de buit	Catalitzador hidrogenat amb suport àcid	Condicions suaus en comparació amb el reactor de llit fluiditzat
Hidrogenació del butadiè	Alúmina amb suport d'un catalitzador d'òxid de pal·ladi	Selectivitat cap a l' 1-butè
Obtenir metanol del gas de síntesi	Courea/Zinc/Alúmina	Millor control de la temperatura i millor rendiment
Metàtesi / Desproporcionallització		
1- Butè = propilè + pentè	Òxids de metall activats	Sobrepasar les limitacions d'equilibri, incrementar la selectivitat i les operacions es realitzen en condicions més suaus
1-Butè = etilè + trans- hexè		

Condensació dels aldehids		
Formaldehid → Trioxà	Àcid fort com a catalitzador	Millorar la conversió
Dimerització / Oligomerització		
Oligomerització de les iso-olefines C4	Resina catiònica i àcid fosfòric sòlid	Produir oligòmers per octanar
Oligomerització dels butens lineals	Catalitzador àcid amb base de níquel	Evitar la formació d'oligòmers C16
Producció del dietanolamina		
Monoetanolamina + òxid d'etilè = dietanolamina	Cap catalitzador ni resines iòniques	Molta selectivitat cap al DEA
Carbonilació		
Metanol/Dimetil èter + CO = àcid acètic	Sistema homogeni	Producció d'àcid acètic d'elevada puresa
Addició d' amines a aldehids o cetones		
Amina primària + òxid mesitilè = acetona + imina	-	Separació de l'amina primària de la secundària, com que aquesta última no reacciona amb l'òxid de mesitilè doncs s'hidrolitza i es forma una amina primària
Acroleïna + anilines substituïdes = base de Schiff	Àcid mineral	Facilita la separació de les impureses d' aldehids dels productes desitjats
Aminació		
Alcohols + anilines substituïdes = amines + aigua	Amb presència d'hidrogen i catalitzador hidrogenat	Millor selectivitat cap el producte
Neutralització (protonació de les bases orgàniques)		
Piridines + àcids carboxílics = sal	-	Punts d'ebullició semblants i millora en quan a la destil·lació convencional
Nitració		
Clorobenzè + àcid nítric = nitroclorobenzè	Eliminació azeotròpica de l'aigua	Eliminar l'aigua incrementa l'acidesa i millora la conversió facilitant la nitració amb l'àcid nítric únicament

Taula 3: Possibles candidats d'aplicació industrial

Detall de les reaccions	Motius o millores amb la destil·lació reactiva
Esterificació o acetalització	
Etanol aquós (80% w/w) → ETBE	En elevades temperatures es minimitza la formació de terbutanol
Esterificació amb alcohols o olefines	
Etanol + àcid fòrmic = format d'etil	Millor selectivitat
Treure l'àcid glicòlic de solucions aquoses i esters	Recuperar l'àcid glicòlic
Esterificació de l'àcid pentanoic amb etanol	Millor selectivitat
Hidratació	
Obtenir propilenglicol de l'òxid de propilè	Alt rendiment
Transesterificació	
Metanol + carbonat d'etilè / propilè	Produir dimetil carbonat (DMC)
Fenol + DMC	Produir metil fenil carbonat o difenil carbonat
Condensació	
Acetona → Isoforona	
Acetaldehid → paraldehid	
Aminació	
Acetona + amoníac	Produir 2,2,6,6 tetrametil - 4-piperdona
Alquilació o dimerització	
Eliminar el estirè de l' etil benzè	
Hidrogenació / hidrodesulfuració / hidrodesnitrogenació	
Hidrogenació del dimetil maleat	
Hidrogenació de fraccions del petroli	Per utilitzar-les posteriorment com a aliment del hidrocracking
Acetalització	
Reaccions del acetaldehid o acetona amb metanol o etanol	Augmenta la selectivitat
Cloració	
Cloració del toluè	Molta selectivitat per quan es vol obtenir clorur de benzil

Separació de punts d'ebullició propers

Mescla de ciclohexè amb ciclohexà	Pels corrents provinents de la hidrogenació del ciclohexè amb poca conversió a ciclohexà
-----------------------------------	------------------------------------------------------------------------------------------

Isomerització

Ciclohexanona oxime → epsilon – caprolactum	Millor rendiment
---------------------------------------------	------------------

Cracking

Diciclopentadiè → ciclopentadiè

Eliminar impureses

Impureses del fenol	Eliminar compostos carbonils
---------------------	------------------------------

Impureses en solucions aquoses de l'etanol	Eliminar l'etil acetat
--------------------------------------------	------------------------

Impureses de l' acetona crua per fer-la reaccionar posteriorment amb la diamina	Eliminar el formaldehid i l' acetaldehid
---------------------------------------------------------------------------------	------------------------------------------

5. MODELS DE LA DESTIL·LACIÓ REACTIVA

Hi ha dos maneres de descriure el comportament de la destil·lació reactiva. La primera manera és similar a l'equilibri líquid-vapor que s'assumeix en una columna de destil·lació convencional. La segona manera és més complexa i considera la fase que no està en equilibri.

Encara que els models que no estan en equilibri són més precisos que els d'equilibri, cadascun s'adreça a resoldre problemes diferents. Així, els models d'equilibri poden ser convenients per processos que s'estan iniciant i per obtenir una primera estimació sobre el comportament de la columna. Per altre banda, els models que no es troben en equilibri són necessaris per estudiar les millores de la columna, pel que fa la zona reactiva.

5.1 Models d'equilibri

5.1.1 Característiques generals

Les principals hipòtesis pels models d'equilibri són:

1. La columna es divideix en un número teòric de estadis on en cadascun el vapor i el líquid estan químicament, tèrmicament i mecànicament en equilibri.
2. Cada fase està perfectament mesclada. Per tant, no hi ha composició, gradients de temperatura o pressió dins d'una fase.

La diferència entre els models, és la manera en que les relacions d'equilibri són expressades. Molts models poden incorporar una reacció d'equilibri constant, mentre altres fan substitucions per evitar la intervenció de la velocitat de reacció.

El principal avantatge del model d'equilibri és la seva simplicitat. Per tant, són molt fàcils de resoldre o de ser integrats. Aquest model és convenient quan es requereix una composició determinada o una temperatura.

El seu inconvenient és moltes vegades no s'arriba a les condicions que s'esperen. Molts dels processos pràctics operen lluny de l'equilibri. Per tant, no és pràctic quan es necessita el que la descripció del procés detallava.

Aquest tipus de model ha estat utilitzat principalment pels dissenys bàsics i pels estudis de rendiment.

5.1.2 Equacions del model d'equilibri (sistema d'equacions MESH)

Els models d'equilibri sovint consisteixen en balanços de matèria (en equacions d'equilibri i sumatoris) i balanços d'energia, es quan parlem del sistema d'equacions MESH.

El balanç de matèria:

$$\frac{dM_{i,p}}{dt} = F_{pZi} + V_{p+1} y_{i,p+1} + L_{p-1} x_{i,p+1} - \{(V_p + S_p^V) y_{i,m} + (L_p + S_p^L) x_{i,m}\} + \sum_{m=1}^{\tau} v_{i,m} R_{m,p} \epsilon_p \quad (5.1)$$

Aquesta equació mostra un esquema teòric d'un estat d'equilibri (p) i del component i on $v_{i,m}$ és la estequiometria del component i en la reacció m i ϵ_p és el volum de reacció.

La composició del vapor $y_{i,p}$ es pot relacionar amb la composició del líquid en la fase d'equilibri mitjançant aquesta relació:

$$y_{i,p} = K_{i,p} \cdot x_{i,p} \quad (5.2)$$

A més sabem també que el sumatori de la composició dels components, tant del líquid com del vapor han de donar 1.

$$\sum_{i=1}^c x_{i,p} = 1 \quad (5.3a)$$

$$\sum_{i=1}^c y_{i,p} = 1 \quad (5.3b)$$

L'esquema de l'equilibri teòric en l'estadi p d'una columna de destil·lació és:

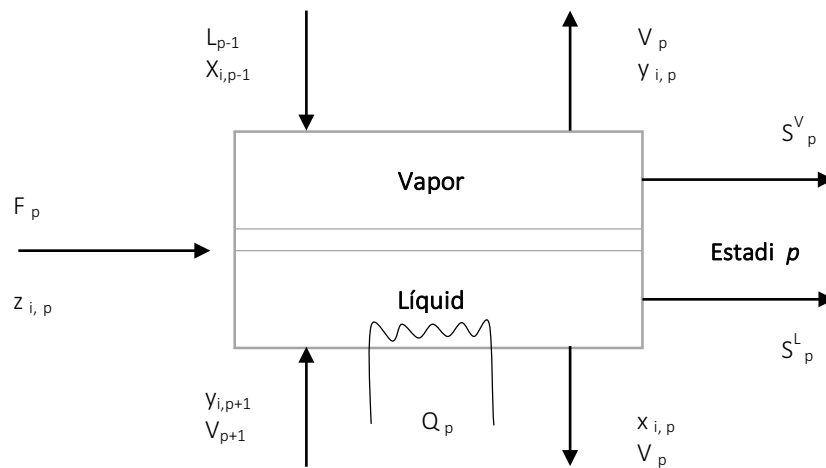


Figura 32: Plat p d'una columna de destil·lació
(Font: Elaboració pròpia)

Els balanços d'energia:

$$\frac{dM_p H_p}{dt} = F_p H_p^F + V_{p+1} H_{p+1}^V + L_{p-1} H_{p-1}^L - \{(V_p + S_p^V) H_p^V + (L_p + S_p^L) H_p^L\} + Q_p \quad (5.4)$$

Quan les entalpies són d'elements purs, llavors no hi ha termes de reacció en els balanços d'energia. Quan parlem d'estat estacionari, el balanç de matèria i el balanç d'energia s'igualen a 0.

Depenent de l'ús final del model i de la complexitat, el model pot incloure més equacions com per exemple, equacions hidràuliques, relacions de control, etc.

5.2 Modificació del model d'equilibri: mètode de Doherty

En l'any 1987, Barbosa i Doherty van proposar una composició de variables per simplificar l'anàlisi de fases simultànies i l'equilibri químic. Ells van utilitzar aquestes variables per desenvolupar taules d'equilibri en la fase reactiva. El sistema consisteix en un destil·lador amb una quantitat de mescla líquida i quan aquesta mescla és escalfada, reaccionen i es separen.

Es defineixen doncs, les noves variables de composició, X_i i Y_i , on les fraccions molars són respectivament, x_i i y_i , i la nova variable de temps τ . Els coeficients de reacció són definits per v .

$$\begin{aligned} X_i &= \frac{\left(\frac{x_i}{v_i} - \frac{x_k}{v_k}\right)}{(v_k - v_T x_k)} \\ Y_i &= \frac{\left(\frac{y_i}{v_i} - \frac{y_k}{v_k}\right)}{(v_k - v_T y_k)} \\ d\tau &= \left(\frac{V}{H}\right) \left(\frac{(v_k - v_T y_k)}{(v_k - v_T x_k)}\right) \end{aligned} \quad (5.5)$$

On c són els components, llavors $i=1, \dots, c$ i $i \neq k$

El principal avantatge d'aquestes variables és que hi ha correspondències directes entre la columna reactiva i la convencional en una destil·lació multicomponent. Per tant els mètodes per la destil·lació convencional poden ser utilitzats per la destil·lació reactiva.

No obstant, en la pràctica han anat apareixent problemes, per exemple, per una simple columna de destil·lació reactiva una nova variable de temps s'ha d'afegir. Això significa que l'aplicació als problemes dinàmics és difícil. A més, seguint amb el problema anterior, es complica encara més quan no es tracta d'una sola reacció ja que no és gens fàcil treballar amb les noves variables de composició.

5.3 Modificació del model d'equilibri: un model basat en l'element

En el 1995, Michelsen proposa utilitzar el model químic per calcular la fase reactiva en equilibri. El model químic involucra totes les equacions d'equilibri químic amb l'apropiat model físic per determinar els potencials químics.

La solució de les equacions del model d'equilibri químic i el criteri d'equilibri prové de les composicions de les diverses fases en l'equilibri.

En el 1997, Pérez-Cisneros, Gani i Michelsen desenvolupen un model que és utilitzat per representar l'equilibri químic i físic d'un sistema multicomponent i de multi-reaccions.

En aquest mètode, un element està definit com un constituent que forma part d'una mescla de components.

L'ús d'elements en comptes de components ofereix molts beneficis per la destil·lació reactiva. Primerament, perquè hi ha o bé menys o igual número d'elements que de components. En segon lloc, que es poden gestionar les reaccions difícils en una via fàcil. En tercer lloc, podem representar un equilibri químic i físic que ens simplificarà el model de la destil·lació reactiva.

No obstant, donat que els balanços involucren tant els elements com els components es fa difícil utilitzar el model per la simulació.

El model basat en l'element va ser utilitzat per estudiar els paràmetres que afecten el model de la destil·lació reactiva. Els diagrames d'equilibri quimicofísics van ser construïts amb aquest model però amb

diferents models termodinàmics. Els resultats mostren que els models termodinàmics apropiats s'han d'utilitzar des del primer moment en que aquests afecten el disseny de la columna.

5.4 Models basats en la freqüència

En aquest model, el transport d'energia i de massa entre fases es considera per tant l'assoliment de l'equilibri es rebaixa. Per exemple, l'assoliment de l'equilibri es fa menor quan la mescla és perfecte, és a dir, que es troba en una fase.

Aquest model es va desenvolupar en el 2000 per Taylor i Krishna.

Aquest tipus de model pot ser molt més precís que els models d'equilibri ja que les propietats de transferència han de estar perfectament determinades.

S'utilitza en l'estudi del comportament de la destil·lació reactiva on el model d'equilibri no dona els resultats desitjats.

6. MODEL MATEMÀTIC

Com a model matemàtic escollim el model d'equilibri que es resol mitjançant les equacions MESH.

Els models d'equilibri tenen avantatges i desavantatges com he comentat anteriorment. El principal inconvenient és que la simulació el model dona uns resultats que no s'aproximen als que s'obtenen en realitat. Per altre banda, té un gran avantatge que és la simplicitat del model.

Com a model d'equilibri assumim el model líquid-vapor. Quan es compara amb altres models d'equilibri, els resultats són qualitativament i quantitativament molt semblants. Però, quan es comparen els resultats obtinguts d'una planta pilot, els resultats de la simulació per l'estat estacionari no es poden reproduir les dades de les composicions ja s'han ignorat algunes de les dades del transport de matèria i d'energia.

Quan es compara amb experiments dinàmics, el model resulta qualitativament similar.

Es descriu el model matemàtic d'una columna de destil·lació reactiva on s'introdueixen dos reactants A i B per formar un producte lleuger C i un producte pesat D.

La separació d'aquest quatre components es duu a terme en una columna de N plats on el primer plat és un condensador total i el plat N és un calderí o un intercanviador de calor parcial.

El model matemàtic consisteix en un sistema d'equacions algebraïques on es descriuen balanços de massa i d'energia dels plats que formen la columna, a més de les equacions d'equilibri vapor-líquid i de l'equilibri de la reacció.

Abans de presentar les equacions s'han d'establir una sèrie d'assumpcions i simplificacions que s'han de tenir en compte a l'hora desenvolupar el model:

- Treballem en estat estacionari
- Les fases líquid-vapor estan en equilibri
- Les fases estan perfectament mesclades
- La dinàmica del vapor és negligida
- Les reaccions són homogènies i tenen lloc en la fase líquida
- L'eficiència de la columna de destil·lació es considera constant. S'estableix constant ja que d'acord amb les quatre assumpcions anteriors, no hi ha gradients de composició dins la fase i no és possible calcular l'eficiència local.
- El percentatge de catalitzador és constant al llarg de la columna
- La pressió en el condensador es considera constant. Això permet que es puguin calcular directament els cabals de vapor.
- No hi ha acumulació en el condensador. Per tant la composició de líquid que surt del condensador és la mateixa que la del vapor que surt de la columna.
- Els arrossegaments són negligibles
- No es consideren els transports de fluids en les canonades
- La destil·lació se suposa que té lloc en un plat perforat

A continuació veiem un esquema d'una columna de destil·lació reactiva:

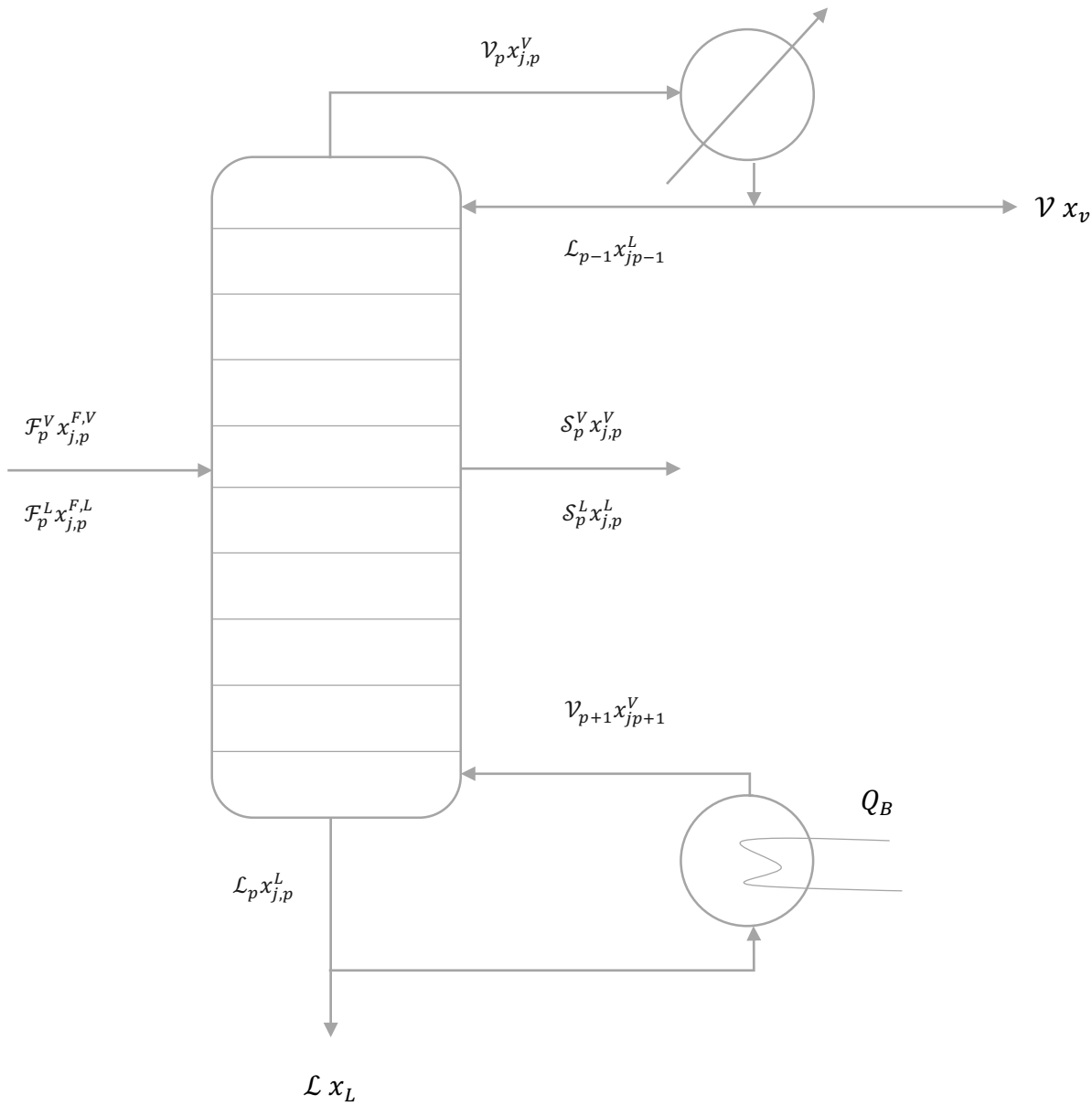


Figura 33: Columna reactiva
(Font: Elaboració Pròpia)

Els símbols utilitzats són els següents:

p : Correspon al número de plat, on $p= 1...NS$.

\mathcal{F}_p^V : Cabal de l'aliment en la fase vapor

\mathcal{F}_p^L : Cabal de l'aliment en la fase líquida

$x_{j,p}^{F,V}$: Fracció molar en el corrent F, de la fase vapor, de l'element j

$x_{j,p}^{F,L}$: Fracció molar en el corrent F, de la fase líquida, de l'element j

\mathcal{V}_p : Cabal de vapor

\mathcal{V}_{p+1} : Cabal de vapor en el plat p+1

x_{jp+1}^V : Fracció molar en el cabal V de l'element j que es troba en el plat p+1

\mathcal{L}_p : Cabal del líquid

\mathcal{L}_{p-1} : Cabal del líquid en el plat p-1

x_{jp-1}^L : Fracció molar del cabal L de l'element j que es troba en el plat p-1

\mathcal{S}_p^V : Cabal del corrent lateral que es troba en fase gas (*)

\mathcal{S}_p^L : Cabal del corrent lateral que es troba en la fase líquida (*)

Q_B : Calor del intercanviador de calor total

(*) El corrent lateral pot ser-hi o no, no sempre és necessari. Aquest es té en compte quan una reacció té unes conversions molt baixes. El fet de anar traient producte mentre es va formant per un corrent lateral, fa que l'equilibri de la reacció es desplaci cap a la dreta i afavorint així la conversió.

Si es focalitza en el estudi d'un plat de la columna, observem:

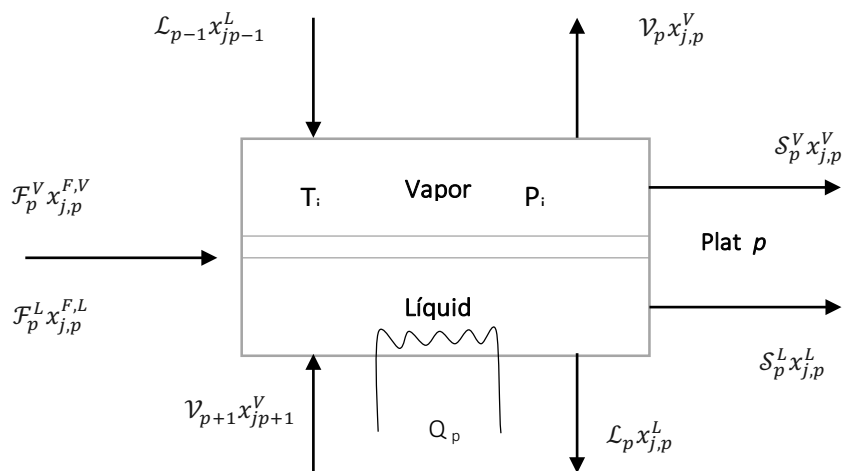


Figura 34: Estudiem un plat p de la columna de destil·lació reactiva
(Font: Elaboració pròpia)

Balanç de matèria de l'element j en el p

$$M_{p,j} = \mathcal{F}_p^V x_{j,p}^{F,V} + \mathcal{F}_p^L x_{j,p}^{F,L} + \mathcal{V}_{p+1} x_{jp+1}^V + \mathcal{L}_{p-1} x_{jp-1}^L - [(\mathcal{V}_p + \mathcal{S}_p^V) x_{j,p}^V + (\mathcal{L}_p + \mathcal{S}_p^L) x_{j,p}^L] + n_{pj}^r \quad (6.1)$$

on n_{pj}^r correspon a la reacció química

Balanç d'energia

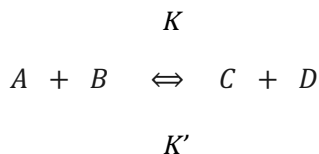
$$E_i = \mathcal{F}_p^V \tilde{H}_p^{F,V} + \mathcal{F}_p^L \tilde{H}_p^{F,L} + \mathcal{V}_{p+1} \tilde{H}_{p+1}^V + \mathcal{L}_{p-1} \tilde{H}_{p-1}^L - [(\mathcal{V}_p + \mathcal{S}_p^V) \tilde{H}_p^V + (\mathcal{L}_p + \mathcal{S}_p^L) \tilde{H}_p^L] \pm Q_p \quad (6.2)$$

on:

\tilde{H}_p^β és l'entalpia específica de la fase β respecte els elements que es troben en plat p
 Q_p és la calor que es dona o es treu del plat p

Relacions d'equilibri de la reacció

Es tracta d'una reacció de quatre components, reversible, de segon ordre:



Per tant les velocitats de reacció seran:

$$r_{j,A} = K_j C_{jA} C_{jB} - K'_j C_{jC} C_{jD} \quad (6.3)$$

Com es considera la densitat constant, la equació anterior queda:

$$r = \frac{-d[A]}{dt} = K \cdot [A]^\alpha \cdot [B]^\beta \quad (6.4)$$

6.1 Mètodes de càlcul

6.1.1 Mètodes aproximats

Els mètodes DISS (Distillation Shortcut) són mètodes aproximats que simulen una columna de destil·lació simple amb una alimentació i dos productes, el destil·lat i el residu.

Encara que es disposa de mètodes rigorosos per la resolució de problemes de separació de sistemes multicomponent, els mètodes aproximats segueixen utilitzant-se en la pràctica amb diferents finalitats, tals com el disseny preliminar, estudis paramètrics per establir les condicions òptimes de disseny, així com per estudis de síntesis del procés per determinar les seqüències òptimes de separació.

Per la determinació del reflux i les etapes necessàries en la destil·lació de sistemes multicomponent tenim el mètode de Fenske-Underwood-Gilliland, que són el nom dels autors de tres importants procediments com són:

- La **equació de Fenske** per el càlcul del número mínim d'etapes teòriques
- La **correlació de Underwood** per calcular la relació de reflux
- La **correlació de Gilliland** per calcular el número d'etapes teòriques per la relació de reflux especificada

Equació de Fenske

Per la separació entre dos components clau d'una mescla multicomponent, es pot obtenir una expressió per el número d'etapes d'equilibri necessàries en condicions de reflux total, és a dir, quan tot el vapor que surt de la etapa n es condensa i retorna a la l'etapa n com a reflux, i tot el líquid que surt de l'etapa 1 es vaporitza i retorna a la etapa 1 com a vapor.

Tenint en compte que podem definir la constant d'equilibri com:

$$y_{i,1} = K_{i,1} \cdot X_{i,1} \quad (6.5)$$

Utilitzant la volatilitat relativa com una constant:

$$\alpha^N = \left(\frac{X_{i,N+1}}{X_{i,1}} \right) \left(\frac{X_{j,1}}{X_{j,N+1}} \right) \quad (6.6)$$

Tenim que:

$$N_{min} = \frac{\log \left[\left(\frac{X_{i,N+1}}{X_{i,1}} \right) \left(\frac{X_{j,1}}{X_{j,N+1}} \right) \right]}{\log \alpha_{i,j}} \quad (6.7)$$

Aquesta és la equació coneguda com Equació de Fenske, on i és el component lleuger i j és el component pesat.

Correlació de Underwood

El reflux mínim és un valor finit, tot i així, una columna no pot operar per sota d'aquesta condició degut a que requereix un número infinit de etapes.

Considerant un balanç total per totes les etapes obtenim:

$$V_{\infty} = L_{\infty} + D \quad (6.8)$$

Combinant aquesta equació amb la relació d'equilibri:

$$y_{i,\infty} = K_{i,\infty} \cdot X_{i,\infty} \quad (6.9)$$

Tenim finalment la relació:

$$\frac{L_{\infty}}{D} = \frac{\left[\frac{X_{i,D}}{X_{i,\infty}} - (\alpha_{i,j})_{\infty} \cdot \frac{X_{j,D}}{X_{j,\infty}} \right]}{(\alpha_{i,j})_{\infty} - 1} \quad (6.10)$$

Si la considerem que es tracta d'una destil·lació ideal idèntica a les de tipus flash, és a dir que $X_{i,\infty} = X_{i,F}$ per el lleuger (i) i pel pesat (j) obtenim que l'equació de Underwood:

$$\frac{(L_{\infty})_{min}}{F} = \frac{\frac{L_F}{F} \left[\frac{DX_{i,D}}{L_F X_{i,F}} - (\alpha_{i,j})_F \cdot \frac{DX_{j,D}}{L_F X_{j,F}} \right]}{(\alpha_{i,j})_F - 1} \quad (6.11)$$

Correlació de Gilliland

La relació real de reflux s'estableix per consideracions econòmiques com un múltiple del reflux mínim. Segons la correlació de Gilliland:

$$R = f \times R_{min} \quad (6.12)$$

on f correspon a :

$$f = \frac{R - R_{min}}{R + 1} \quad (6.13)$$

Així, a partir d'aquesta consideració es determina el corresponent número d'etapes mitjançant un mètode adequat.

El valor de reflux real dividit pel valor mínim de reflux es considera en moltes ocasions igual a 1,05. Tot i així, a la pràctica es considera que :

$$\frac{R}{R_{min}} = 1,1$$

Quan es tracta d'una columna amb un gran nombre d'etapes i quan és un nombre petit és:

$$\frac{R}{R_{min}} = 1,5$$

En molts casos s'agafa un valor intermedi que correspon a 1,30.

Aquest mètodes aproximats tenen moltes restriccions, com aquestes:

- No incorporen azeotrops
- No tenen en compte les reaccions ni les descomposicions
- Només són adequats a nivells moderats de pressió i temperatura

Per tant en el cas de la destil·lació reactiva, no podem tenir en compte aquestes relacions empíriques i s'ha d'anar a altres consideracions elaborades específicament per aquest tipus d'operació.

Un dels mètodes que és per la destil·lació reactiva, és el mètode de Adams-Moulton, que és un mètode simple, ràpid i numèricament estable per resoldre problemes de destil·lació amb reacció. Aquest mètode té l'avantatge que no són necessàries tècniques de correcció, aconseguint així uns resultats que són molt propers als que s'obtenen experimentalment.

Mètode de Adams-Moulton

Si fem un esquema senzill d'un plat tal que:

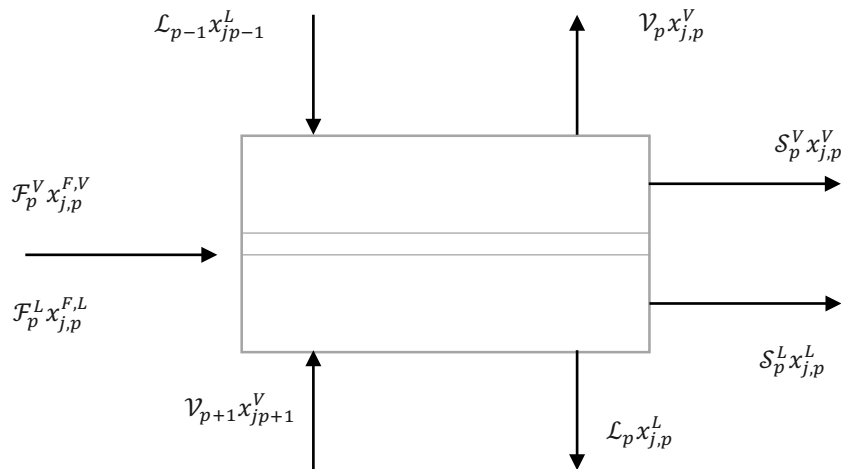


Figura 35: Esquema senzill per un plat p
(Font: Elaboració pròpia)

Es pot descriure la variació del volum del líquid en el plat p del component j amb respecte al temps de la manera següent:

$$\frac{dH, X_j}{dt} = F_p^V x_{j,p}^{F,V} + F_p^L x_{j,p}^{F,L} + V_{p+1} x_{jp+1}^V + L_{p-1} x_{jp-1}^L - [(V_p + S_p^V) x_{j,p}^V + (L_p + S_p^L) x_{j,p}^L] + n_{pj}^r \quad (6.13)$$

Com que $x_{j,p}^V$ pot ser expressat en funció de la constant d'equilibri vapor-líquid $K_{j,p}$ ja que:

$$x_{j,p}^V = y_{j,p}$$

per tant:

$$y_{j,p} = K_{j,p} \cdot X_{j,p} \quad (6.14)$$

Obtindrem els següents grups d'equacions:

$$DH \cdot X_j = VL_j \cdot X_j + F_j + NR_j \quad (6.15)$$

on:

$$DH \cdot X_j = \left(\frac{dH_1 X_{1j}}{dt} \dots \frac{dH_n X_{nj}}{dt} \right)^T \quad (6.16)$$

$$F_j = (F_1^V Y_{1j}^F + F_1^L X_{1j}^F, \dots, F_n^V Y_{nj}^F + F_n^L X_{nj}^F)^T \quad (6.17)$$

$$NR_j = (n_{1j}^R, \dots, n_{nj}^R)^T \quad (6.18)$$

$$X_j = (X_u, \dots, X_{nj})^T \quad (6.19)$$

$$VL_j = \begin{bmatrix} A_1 & V_2 K_{2j} & \cdot & \cdot & \cdot \\ L_1 & A_2 & \cdot & V_3 K_{3j} & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & L_{n-2} & A_{n-1} & V_n K_{nj} \\ \cdot & \cdot & \cdot & L_{n-1} & A_n \end{bmatrix} \quad (6.20)$$

$$A_p = -L_p - (V_p - S_p^V) K_{j,p} - \mathbb{Q}_p^L \quad (6.21)$$

Segons Adams - Moulton s'aplica una fórmula a la equació número (6.15) que deixa l'equació de la següent forma:

$$\left(I - \frac{\Delta t}{2} VL \right) X_j^K = \frac{\Delta t}{2} (F_j^K + F_j^{K-1}) + \left(\frac{\Delta t}{2} VL + I \right) X_j^{K-1} + \frac{\Delta t}{2} \cdot (NR_j^K + NR_j^{K-1}) \quad (6.22)$$

Així, la dependència no lineal del número de mols reaccionats Nr_j en la mescla produeix la no linealitat del sistema d'equacions (6.22). No obstant, com assumim que el número de mols reaccionats en cada plat és independent a la composició del líquid en cada plat, el sistema d'equacions (6.22) pot ser tractat com una relació lineal de la composició x_j

Seguint aquestes equacions Adams-Moulton estableix un algoritme del mètode proposat d'aquesta manera:

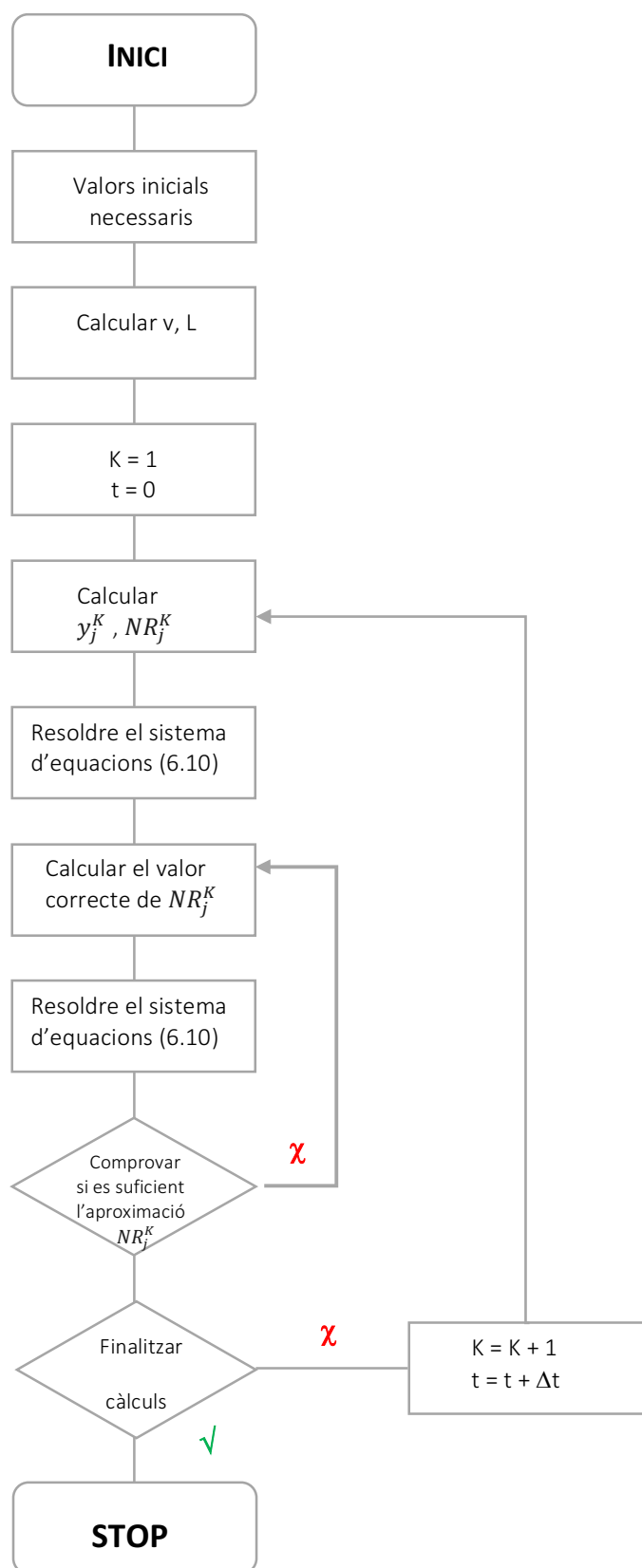


Figura 36 : Algoritme mètode Adams- Moulton
(Font: Elaboració pròpia)

6.1.2 Mètodes rigorosos

El tractament de mescles multicomponents en una columna de rectificació a través de un anàlisi rigorós requereix la solució simultània de les relacions bàsiques que es produeixen en cada plat, considerant que en cada plat té lloc un equilibri entre els corrents de vapor i líquid que surten d'ell. Les relacions que tenen lloc en cada plat són ja les definides en el model matemàtic i que forma el grup d'equacions MESH:

1. Balanç de Matèria
2. Relacions d'Equilibri
3. Relacions de Suma
4. Balanç d'energia (Heat)

Tres mètodes d'aquest tipus utilitzats per solucionar problemes de destil·lació reactiva són els següents:

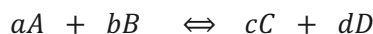
- Mètode θ de convergència
- Mètode 2n de Newton-Raphson
- Mètode del algoritme de banda estreta

D'aquest mètodes, els dos primers es recomanen per mescles que no es desviïn massa de les solucions ideals. Per mescles que són altament no ideals, es recomana una formulació de l'algoritme de banda estreta.

Són mètodes que utilitzen l'aplicació de l'àlgebra lineal i més concretament, la tècnica tridiagonal, que es resol per tempteig. Encara que la resolució d'aquestes equacions és lenta i complicada per mètodes manuals, resulta senzilla utilitzant un programa d'ordinador.

Mètode $N(c+2)$ de Newton-Raphson

Si considerem que en cada etapa té lloc l'equació:



L'expressió de la velocitat corresponent és:

$$r_{j,A} = K_j C_{jA} C_{jB} - K'_j C_{jC} C_{jD} \quad (6.23)$$

anomenarem η_j als mols de A que reaccionen per unitat de temps i volum en la etapa j.

Com en aquest cas només té lloc una reacció, resulta que tindrem $3N$ variables independents que resulten de: $r = 1$ y $N(r + 2) = 3N$

Aquestes variables independents són: $\frac{L_j}{V_j}$, T_j i η_j .

La variable $\frac{L_j}{V_j}$ es normalitza mitjançant la variable θ_j definida com:

$$\frac{L_j}{V_j} = \theta_j \left(\frac{L_j}{V_j} \right)_a = b_j \quad (6.24)$$

Per tant el valor de θ_j s'aproximarà a la unitat a mesura que ens anem aproximant al sistema de solució de valors de les variables.

Corresponent amb aquestes 3N variables independents s'han de seleccionar 3N funcions independents. Aquestes 3N funcions que es prenen són:

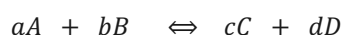
- Les funcions del punt de rosada $\{F_j\}$
- Les funcions de balanç d'entalpia $\{G_j\}$
- Les funcions de reacció $\{R_j\}$

Per la solució dels valors de les variables independents, els valors corresponents de les variables dependents es poden trobar utilitzant els balanços de massa per component, relacions d'equilibri i els balanços de massa totals.

Els sistema complet d'equacions es pot plantejar de forma matricial, de la forma següent:

$$A_j \cdot v_j = -v_j \cdot \eta \quad (6.25)$$

que es forma a partir dels balanços de massa de la reacció:



$$\gamma_A A + \gamma_B B + \gamma_C C + \gamma_D D = 0$$

$$r = -1$$

$$\gamma_B = \frac{-b}{a} \quad \gamma_C = \frac{c}{a} \quad \gamma_D = \frac{d}{a}$$

Suposem que la mescla en cada plat és total i que desapareixen η_p mols de A per reacció i unitat de temps en qualsevol plat p.

Per tant el balanç de massa pel component j en una etapa és:

$$p(p \neq 1, F-1, f, N)$$

$$M_j v_{p+1,j} + M_j l_{p-1,j} - M_j \eta_{pj} - M_j l_{pj} + M_j S_{pj} = 0 \quad (6.26)$$

on M_j és el pes molecular del component

Simplificant de la equació anterior el terme M_j que és comú en tots els termes, ens queda:

$$v_{p+1,j} + l_{p-1,j} - v_{pj} - l_{pj} + S_{pj} = 0 \quad (6.27)$$

Utilitzant la relació d'equilibri vapor-líquid $l_{pj} = A_{pj} \cdot v_{pj}$ obtenim:

$$A_{p-1,j} v_{p-1,j} - (1 + A_{pj}) v_{pj} + v_{p+1,j} = -\delta_{pj} \quad (6.28)$$

temin que $\delta_{pj} = v_j \cdot \eta_j$

Així el sistema complet queda com ja s'ha mencionat abans, és a dir:

$$A_j \cdot v_j = -v_j \cdot \eta$$

$$\eta = [\eta_1 \cdot \eta_2 \cdots \eta_n]^T$$

El balanç de massa total que engloba un plat típic p, es troba sumant cada membre de l'equació per tots els components j, obtenint així:

$$V_{p+1} + L_{p-1} - V_p - L_p - A_p = 0 \quad (6.29)$$

on:

$$A_p = \sum_{j=1}^c S_{pj} = \eta_p \sum_{j=1}^c v_j = \eta_p \cdot \sigma \quad (6.30)$$

$$\sigma = \sum_{j=1}^c v_j$$

Si anomenem b_p al valor suposat L_p/V_p en el plat p, l'equació pot ser plantejada en termes de V_p i b_p de la forma:

$$b_{p-1}V_{p-1} - (1 + b_p)V_p + V_{p+1} = -\sigma \cdot \eta_j \quad (6.31)$$

Amb lo qual es pot representar l'equació matricial:

$$BV = -F \cdot \sigma \eta \quad (6.32)$$

on B és una matriu tridiagonal de la forma:

$$B = \begin{bmatrix} -(1 + b_1) & 1 & 0 & 0 & 0 \\ b_1 & -(1 + b_2) & 1 & 0 & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & \cdots & 0 & b_{n-1} & -(1 + b_n) \end{bmatrix}$$

i F i V són els vectors de la forma:

$$F = [0 \cdots 0 V_F L_F 0 \cdots 0]^T$$

$$V = [DV_2 \cdots V_N]^T$$

Els balanços de massa totals es poden plantejar en termes de les variables independents L_p/V_p i resoldre pel vapor V tal i com indica la següent equació:

$$BV = -F - \sigma \eta$$

Formulació del mètode de Newton-Raphson

Aquest mètode ens permetrà buscar el sistema de solució dels valors de les variables independents:

$$X = [\eta_1 \dots \eta_2, \dots, \eta_N, \vartheta_1, \vartheta_2, \dots, \vartheta_N, T_1, T_2, \dots, T_N]^T$$

tal que cadascuna de les funcions:

$$f = [R_1 \dots R_2, \dots, R_N, F_1, F_2, \dots, F_N, G_1, G_2, \dots, G_N]^T$$

sigui igual a zero.

Això es pot obtenir mitjançant aquest mètode, que consisteix en la solució repetida de l'equació:

$$J \cdot \Delta X = -f \quad (6.33)$$

on:

$$J = \begin{bmatrix} \frac{\partial R_1}{\partial \eta_1} & \dots & \frac{\partial R_1}{\partial T_N} \\ \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial F_1}{\partial \eta_1} & \dots & \frac{\partial F_1}{\partial T_N} \\ \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial G_1}{\partial \eta_1} & \dots & \frac{\partial G_1}{\partial T_N} \end{bmatrix}$$

$$\Delta X = X_{K+1} - X_K = [\Delta \eta_1, \Delta \eta_2, \dots, \Delta \eta_N, \dots, \Delta \vartheta_N, \dots, \Delta T_N]^T$$

Amb el sistema de Newton-Raphson convencional no permet trobar una solució on el sistema d'equacions convergeixi degut a que resultava massa sensible al sistema de valors inicials de η_p , va ser necessari modificar el procés de la forma següent:

Per cada valor inicial que es prengui de T_p i de θ_p , es resolen els balanços de massa totals pel sistema de η_j que es van fer cada una de les R_p igual a zero.

Així, les equacions de Newton-Raphson són de la forma:

$$J_R \cdot A_\eta = -R \quad (6.34)$$

on:

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial R_1}{\partial \eta_1} & \dots & \frac{\partial R_1}{\partial \eta_N} \\ \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial R_N}{\partial \eta_1} & \dots & \frac{\partial R_N}{\partial \eta_N} \end{bmatrix}$$

$$A_\eta = \eta_{n+1} - \eta_n = [\Delta \eta_1, \Delta \eta_2, \dots, \Delta \eta_N]^T$$

$$R = [R_1 \dots R_2, \dots, R_N]^T$$

Després d'haver trobat les η_p que fan que cada $R_j = 0$, aquestes s'utilitzen juntament amb el sistema de T_p i de θ_p per comprovar el seu resultat amb les equacions de J i f de l'equació:

$$J \cdot \Delta X = -f$$

El procediment és el següent:

- 1) Es suposa un sistema de valors per $\left(\frac{L_p}{V_p}\right)_{a,K}$
- 2) S'igualava cada $\theta_{p,k} = 1$
- 3) Es suposa un sistema de valors per $T_p, k, (TK), \eta_{p,n}(\eta_\eta)$
- 4) En base als valors suposats, es resol de manera repetida l'equació fins trobar un sistema de $\eta(\eta_K)$ que ens doni com a resultat $R=0$
- 5) Amb el sistema de valors obtinguts en el pas anterior de les variables: $\eta_K, \left(\frac{L_p}{V_p}\right)_K = \theta_{p,k} \cdot \left(\frac{L_p}{V_p}\right)_{a,K}$ i T_K , es valori el resultat de fK .

Si cada element de $K - (fK - 1)$ ens satisfà la convergència, s'acaben els resultats. Si no és així, es valoraran els elements de JK i es resol la equació:

$$J \cdot \Delta X = -f$$

Es resol per ΔX i es calcula X_{K+1}

Si cada $T_{p,K+1}$ es troba dins dels rangs acceptables i cada $\theta_{p,k+1} > 0$ llavors es calcula:

$$\left(\frac{L_p}{V_p}\right)_{a,K+1} = \theta_{p,k+1} \cdot \left(\frac{L_p}{V_p}\right)_{a,K}$$

i es torna a començar per pas 1.

Si això no és així, es redueix de forma repetida la correcció de ΔX pel factor:

$$\beta \left(\beta = \frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \dots \right)$$

$$X_{K+1} = X_K + \beta \Delta X$$

fins trobar una X_{K+1} que satisfaci el criteri anterior. Llavors es calcula la relació $\left(\frac{L_p}{V_p}\right)_{a,K+1}$

Es canvia el subíndex de K per $K+1$

Com es pot comprovar en el procés que s'ha de seguir per arribar a una solució amb el mètode de Newton-Raphson, és un mètode molt lent i complicat, fa que sigui indispensable la utilització d'un programa informàtic que de forma ràpida es pot arribar a la obtenció d'uns resultats que convergeixin en les equacions, segons hem vist.

7. MÈTODES EXPERIMENTALS PER DETERMINAR LA FASE D'EQUILIBRI EN SISTEMES AMB REACCIÓ

Pel disseny d'un procés de destil·lació reactiva s'ha de tenir informació de la reacció i informació de la fase d'equilibri, especialment l'equilibri líquid-vapor, en alguns casos l'equilibri líquid-líquid. Els estudis de la fase d'equilibri en sistemes amb reacció, generalment no posen problema si la reacció no és ni molt ràpida ni molt lenta comparada amb el temps constant de la fase d'equilibri que s'ha obtingut experimentalment. En el primer cas, on la reacció és molt ràpida, la solució sempre estarà en l'equilibri químic. En el segon cas, quan la reacció és molt lenta, la reacció es realitzarà.

La definició del temps experimental constant de la fase d'equilibri dependrà del tipus d'aparell que s'utilitzi. Si la destil·lació reactiva és catalitzada i el catalitzador no intervé substancialment en la fase d'equilibri, els experiments de la fase d'equilibri es poden realitzar sense catalitzador, però ens podem trobar que la reacció no tingui lloc o que obtinguem una petita conversió.

Els problemes per determinar experimentalment la fase d'equilibri ens els trobem si el temps constant de la reacció té la mateixa magnitud que les constants de temps de la fase d'equilibri experimental.

Els experiments per trobar les fases d'equilibri es classifiquen:

- Mètodes sintètics
- Mètodes analítics

En els mètodes sintètics, s'evita la anàlisi de fases coexistents ja que utilitzen la informació de la composició de l'aliment. El valor dels mètodes sintètics per mesurar la fase d'equilibri és òbviament limitat. Aquests mètodes s'utilitzen per estudis per reaccions totalment equilibrades, també s'utilitzen juntament amb tècniques d'extrapolació per eliminar la influència de la reacció.

Els mètodes analítics es poden classificar en mètodes que necessiten mostres, com la cromatografia o la valoració, i en mètodes que no necessiten mostres, com la espectroscòpia.

Les mostres són sovint un problema en sistemes on hi ha reacció ja que es pot produir un canvi de concentració lluny d'un equilibri químic establert o les mostres poden reaccionar després de ser agafades. Per tant la espectroscòpia és la tècnica més utilitzada en sistemes on hi ha reacció.

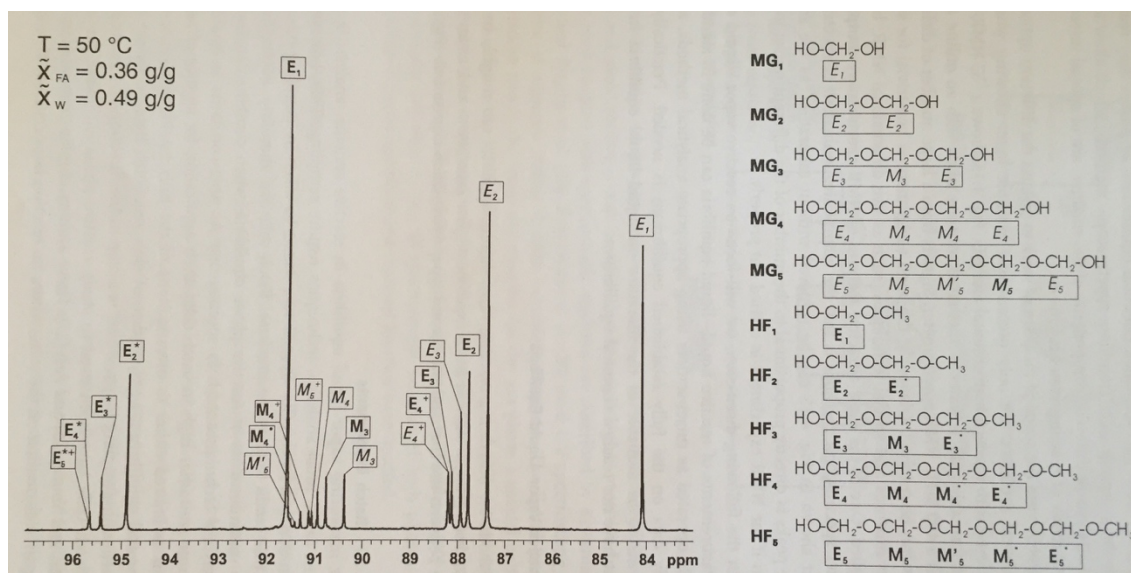


Figura 37: Exemple d'espectrografia d'una mescla de formaldehid + aigua + metanol
 (Font: Sundmacher, K. Reactive distillation)

7.1 Equilibri líquid-vapor

En aquest apartat es descriu com es troba experimentalment l'equilibri líquid-vapor en sistemes en reacció. Aquests mètodes són:

- Experiments Batch
- Experiments de cabal
- Experiments de recirculació

7.1.1 Experiments Batch

Per mesurar l'equilibri líquid-vapor, en molts casos, la anàlisi és necessària. Moltes de les tècniques analítiques requereixen mostres. Això, sovint, no és trivial per una cel·la batch. S'ha de tenir especial tacte quan s'agafen mostres en la fase gas, ja que això tendeix a alterar la pressió.

Les cel·les batch són especialment atractives per mesurar l'equilibri líquid-vapor en sistemes amb reacció quan es combina amb tècniques analítiques com la espectroscòpia.

Com a constants de temps per establir l'equilibri són bastant elevades per les cel·les batch, per tant aquest mètode és limitat quan es vol establir totalment l'equilibri líquid-vapor o quan s'estudia reaccions lentes. Les cel·les batch sovint són combinades amb bucles de mostreig, on és un pas de la recirculació.

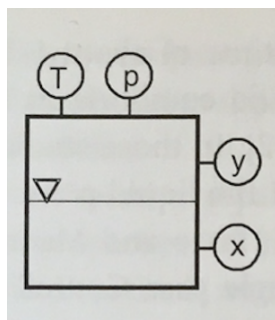


Figura 38: Cel·la batch

(Font: Sundmacher, K. Reactive distillation)

7.1.2 Experiments de cabal

El principal avantatge de les cel·les de cabal amb les cel·les batch és que agafar mostres, generalment no són un problema, especialment en la fase gas. A més a més el temps per establir la fase d'equilibri, després de l'evaporació en la unitat de separació + equilibri, es pot agafar més baix i utilitzant els paràmetres desitjats.

Per reaccions amb constants de temps de l'ordre de minuts, els experiments de cabals es poden utilitzar per mesurar la fase d'equilibri sense haver aconseguit encara l'equilibri químic.

L'inconvenient d'aquest mètode és la quantitat elevada de substància que es necessita per dur-ho a terme.

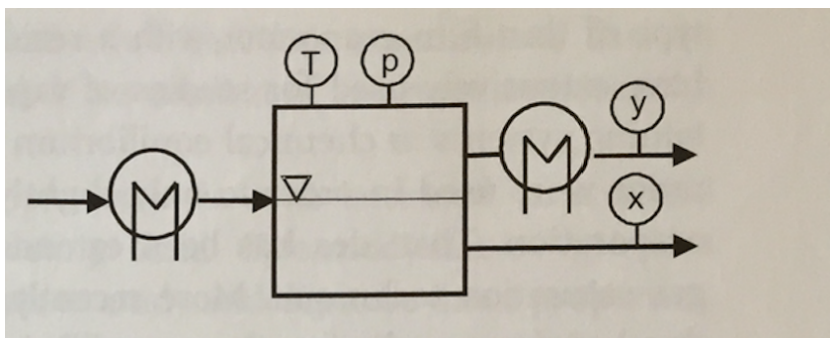


Figura 39: Cel·la de cabal

(Font: Sundmacher, K. Reactive distillation)

7.1.3 Experiments de recirculació

L'inconvenient que teníem amb les cel·les de cabal es pot evitar utilitzant les cel·les de recirculació. No obstant, les cel·les de recirculació poden causar problemes si la reacció té lloc en el corrent de recirculació ja que farà variar la composició del corrent que entra al evaporador i per tant no s'arribarà al estat estacionari.

Tot i així, les cel·les de recirculació han estat emprades en molts estudis per obtenir l'equilibri líquid-vapor. S'utilitza sobretot per reaccions d'esterificació, en aquestes reaccions hi ha suficient temps per arribar a l'estat estacionari.

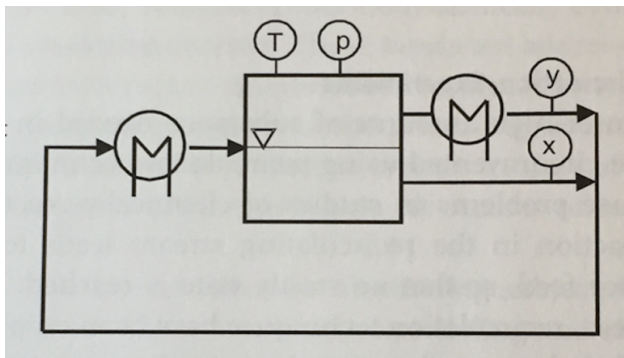


Figura 40: Cel·la de recirculació

(Font: Sundmacher, K. *Reactive distillation*)

Hi ha varies opcions per mesurar la fase d'equilibri en sistemes amb reacció, on es permet dur a terme cada estudi amb una ampla gama de sistemes i condicions. La principal limitació pel sistemes experimentals per trobar l'equilibri líquid-vapor on hi ha reacció, està relacionada amb la velocitat de reacció. Si es necessiten mesures de la solució per la fase d'equilibri i aquesta encara no està en l'equilibri, la reacció es pot fer considerablement més lenta que la constant de temps que teníem establerta per la fase d'equilibri.

Hi ha aparells disponibles on la constant de temps es troba clarament per sota d'un minut. Per sistemes amb reacció és molt ràpid estudiar-ho amb aquests aparells i en molts casos és possible tractar la reacció com a reacció d'equilibri i per tant obtenir la informació de la fase d'equilibri en les mesclures, sense necessitar que estigui químicament equilibrada.

8. HYSYS: PROGRAMA DE SIMULACIÓ

8.1 Què és el HYSYS?

HYSYS és un programa de simulació que va ser desenvolupat en el seu moment per Hyprotech per simular molts dels processos que engloba el gran món de la enginyeria química.

HYSYS és un programa amb aquestes característiques:

- Integrat
- Intuïtiu i interactiu
- Obert i extensible

És integrat ja que es va desenvolupar coneixent la magnitud amb la qual la indústria química creix i amb ella, la demanda de tenir un programa per poder simular qualsevol situació que es plantejés en qualsevol tipus d'indústria química.

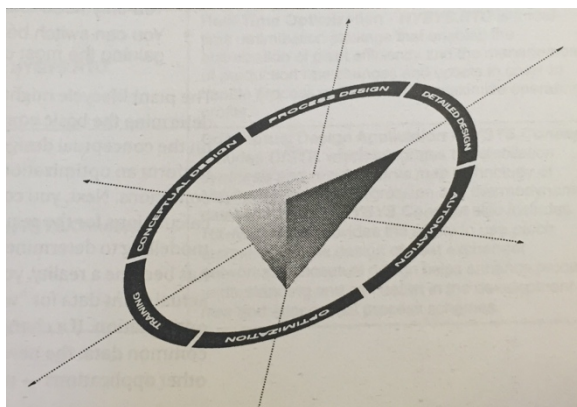


Figura 41: Símbol HYSYS.Plant

(Font: Brenner,S., Gierer,C., Strashok,C., Hugo,L., Sachedina,M., Chau,A., Jamil,A., Nguyen,N., Sternon,Y., Hanson,K.,Lowe,C. HYSYS.Plant, Steady State Modelling)

Si observem el dibuix, la cunya que es troba al centre representa els paràmetres comuns en el nucli de les diferents eines dels models: Models de topologia, Termodinàmica, Interconnexió.

L'anell exterior representa les aplicacions dels models que són necessàries al llarg de la simulació. I les fletxes representen cada producte que s'obté de Hyprotech utilitzant el nucli comú, tenint en compte les dades universals que comparteixen entre totes les eines mentre s'arriba a una solució completa de la simulació.

HYSYS té com a avantatges:

- Es comparteix la informació en comptes de ser transferida, entre totes les aplicacions
- Totes les aplicacions utilitzen els models comuns de termodinàmica
- Totes les aplicacions utilitzen una tipologia de diagrama de flux
- Només necessites per aprendre una única interconnexió
- Pots variar entre les aplicacions de model en qualsevol moment, d'aquesta manera es fa més entenedor el procés

HYSYS és intuïtiu i interactiu ja no només t'ajuda a fer més eficient el teu procés, el fet de tenir que construir el teu model interactivament i obtenint uns resultats immediats fa que arribis a comprendre molt millor tot el que ho engloba.

HYSYS és obert i extensible ja que tu pots desenvolupar unes operacions unitàries personalitzades, tant en estat estacionari com en estat dinàmic, pots especificar les reaccions cinètiques i posar un conjunts de propietats específiques per l'operació que necessitis.

Tot i que actualment hi ha versions del HYSYS actualitzades que s'adapten a les evolucions que desenvolupa el món de la indústria química, en el meu cas, per realitzar la simulació de la destil·lació reactiva, utilitzaré el HYSYS.plant, una versió més antiga però que és suficient útil per la meva simulació.

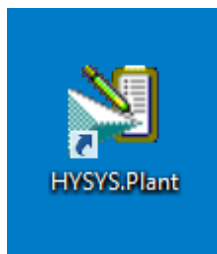


Figura 42:

Foto de la icona de HYSYS.Plant

8.2 Tipus de Fluid Package

En el HYSYS, tota la informació necessària que pertany a un component pur i els càlculs físics estan englobats en el *Fluid Package*.

Hi ha diversos tipus de *Fluid Package*, cadascun amb característiques diferents i que has d'escollir segons el tipus de procés que vols simular.

Els *Fluid Package* els han classificat en equacions d'estat i en models d'activitat.

Taula 4: Equacions d'estat i models d'activitat del Fluid Package

EQUACIONS D'ESTAT

GCEOS	<i>Aquest model et permet definir i implementar una equació d'estat cúbica generalitzada que inclou les regles de mescla i la translació de volum.</i>
Kabadi Danner	<i>Aquest model és una modificació de l'equació d'estat SRK. Millora els càlculs de les dades d'equilibri líquid-líquid en sistemes on hi ha aigua i hidrocarburs, particularment en regions diluïdes.</i>
Lee-Kesler Plocker	<i>Aquest model és el més indicat per les mescles o substàncies no polars</i>
MBWR	<i>Aquest és una modificació de la versió original de l'equació de Benedict/Webb/Rubin. És aplicable a components i/o operacions molt concretes.</i>
Peng Robinson	<i>Aquest model és ideal pels càlculs de les dades d'equilibri vapor-líquid com també pel càlcul de les densitats líquides pels sistemes que treballen amb hidrocarburs.</i>
PRSV	<i>És una modificació de l'equació d'estat PR. Aquesta s'aplica en sistemes moderadament no ideals.</i>
SRK	<i>En alguns casos és pràcticament comparable a l'equació de PR però el rang d'aplicacions és més limitat. Aquest mètode no es pot aplicar en sistemes que no són ideals.</i>

Sour PR Combina l'equació PR i el model de Wilson

Sour SRK Combina l'equació SRK i el model de Wilson

Zudkevitch Joffee És una modificació de l'equació SRK. Aquesta fa millors prediccions sobre l'equilibri vapor-líquid en sistemes que treballin amb hidrocarburs i amb sistemes que contenen hidrogen.

MODELS D'ACTIVITAT

Chien Null Prové d'un marc de referència consistent que aplica uns models d'activitat binaris existents per base binaria. Et permet escollir el millor model per cada parell del teu cas.

Extended NRTL Aquesta variació del model NRTL et permet donar com a input els valors de A_{ij} , B_{ij} , C_{ij} , D_{ij} , $Alp1$ i $Alp2$ com a coeficients d'activitat. S'utilitza per components on el seu rang entre les temperatures d'ebullició és ampli. També per sistemes que requereix una solució simultània de VLE i LLE.

General NRTL Aquesta variació del model NRTL et permet seleccionar el format d'equació pels següents paràmetres: α i τ . S'utilitza per components on el seu rang entre les temperatures d'ebullició és ampli. També per sistemes que requereix una solució simultània de VLE i LLE.

NRTL És una extensió de l'equació de Wilson. Utilitza mecanismes estadístics. És capaç de representar els comportaments de VLE, LLE i VLLE.

Margules Aquest va ser el primer en representar l'excés de l'energia de Gibbs. L'equació no té cap base teòrica, però és útil per estimar i interpolar dades molt ràpidament.

UNIQUAC Utilitza mecanismes estadístics i la teoria de quasi-química de Guggenheim per representar l'estructura d'un líquid. És capaç de representar els comportaments de VLE, LLE i VLLE tant com el model NRTL però sense la necessitat d'un factor no aleatori.

Van Laar Aquesta equació encaixa molt bé en varis sistemes, particularment en distribucions LLE. S'utilitza per sistemes que tenen desviacions negatives o positives de la llei de Raoult, tot i així, no pot predir el coeficient d'activitat màxim ni mínim.

Wilson La primera equació pel coeficient d'activitat que utilitza el model de composició local que deriva de l'expressió de l'excés de l'energia de Gibbs. Ofereix una aproximació termodinàmica contundent per predir comportaments multicomponents a partir de la regressió de les dades d'equilibri.

8.3 Models matemàtics per la termodinàmica

Els models matemàtics per la termodinàmica que utilitza el HYSYS es basen en balanços de matèria i en balanços d'energia. Com que es poden realitzar moltes operacions i que cadascuna requereix un tipus d'equip, i per tant un model de càlcul diferent, em centraré a explicar quin model termodinàmic utilitza el HYSYS per una columna de destil·lació.

Agafem un plat p de la nostra columna de destil·lació:

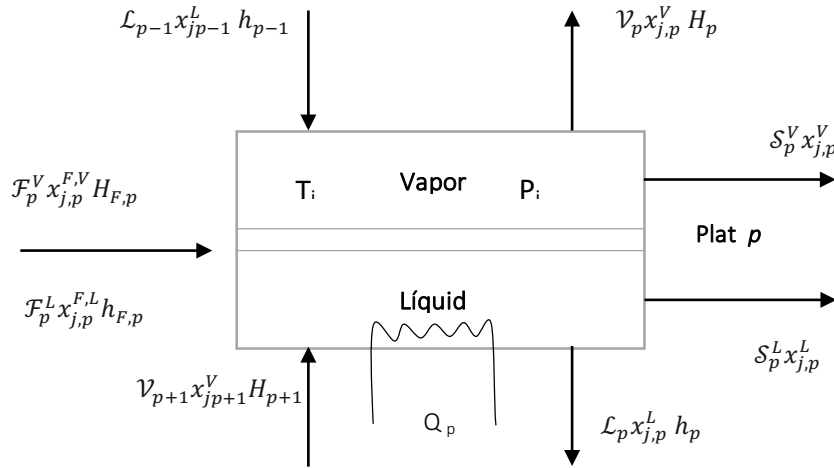


Figura 43: Estudi d'un plat p en una columna de destil·lació
(Font: Elaboració pròpia)

Balanç de matèria

$$0 = F_p^{V+L} + V_{p+1} + L_{p-1} - [(V_p + S_p^V) + (L_p + S_p^L)] \quad (8.1)$$

Balanç de matèria de l'element j en el p

$$0 = F_p^V x_{j,p}^{F,V} + F_p^L x_{j,p}^{F,L} + V_{p+1} x_{jp+1}^V + L_{p-1} x_{jp-1}^L - [(V_p + S_p^V) x_{j,p}^V + (L_p + S_p^L) x_{j,p}^L] \quad (8.2)$$

Balanç d'energia

$$0 = F_p^V H_p^F + F_p^L h_p^F + V_{p+1} H_{p+1} + L_{p-1} h_{p-1} - [(V_p + S_p^V) H_p + (L_p + S_p^L) h_p] \pm Q_p \quad (8.3)$$

on:

H_p és l'entalpia específica de la fase vapor respecte els elements que es troben en plat p

h_p és l'entalpia específica de la fase líquida respecte els elements que es troben en plat p

Q_p és la calor que es dona o es treu del plat p

8.4 Models matemàtics per les reaccions

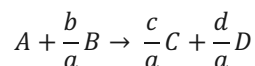
Les reaccions dins dels HYSYS estan definides dins del *Reaction Manager*. Un cop prèviament s'han escollit els components del teu procés pots dur a terme diferents tipus de reaccions:

Taula 5: Tipus de reaccions que contempla el HYSYS.Plant

TIPUS DE REACCIÓ	REQUERIMENTS
Conversió	Requereix l'estequiometria de totes les reaccions i la conversió sobre un dels components .
Equilibri	Requereix l'estequiometria de totes les reaccions. El terme $\ln(k)$ es pot calcular utilitzant diferents mètodes. Es determina l'ordre de la reacció per cada component dels coeficients estequiomètrics.
Cinètica	Requereix l'estequiometria de totes les reaccions, com l'energia d'activació i el factor de freqüència en l'equació d'Arrhenius.
Catàlisi heterogènia	Requereix els termes de la cinètica de la reacció com també l'energia d'activació, el factor de freqüència i els exponents dels components en la cinètica d'absorció.
Reacció simple	Requereix l'estequiometria de totes les reaccions com l'energia d'activació i el factor de freqüència en l'equació d'Arrhenius. Les constants d'equilibri es necessiten si la reacció és inversa.

8.4.1 Conversió

Considerem la següent reacció:



on a, b, c i d són els respectius coeficients estequiomètrics dels reactius A i B i dels productes C i D.

El reactiu A és el reactiu limitant.

En general, les reaccions del components segueix:

$$N_A = N_{A0}(1 - X_A) \quad (8.4a)$$

$$N_B = N_{B0} - \frac{b}{a}N_{A0}X_A \quad (8.4b)$$

$$N_C = N_{C0} + \frac{c}{a}N_{A0}X_A \quad (8.4c)$$

$$N_D = N_{D0} + \frac{d}{a}N_{A0}X_A \quad (8.4d)$$

on:

N_x = Mols finals del component (x= A, B, C i D)

N_{x0} = Mols inicials del component x

X_A = La conversió del component A

El percentatge de conversió queda definit per la següent funció que depèn de la temperatura:

$$\text{Conversió} = C_0 + C_1 \cdot T + C_2 \cdot T^2 \quad (8.5)$$

Aquest percentatge és en base el reactiu limitant que és el que s'ha consumit totalment.

Per obtenir la conversió, has d'especificar C_0 en %.

Uns valors negatius de C_1 i C_2 signifiquen que la conversió disminueix si incrementem la temperatura i viceversa.

Base Component	
Rxn Phase	Overall
Co	<empty>
C1	<empty>
C2	<empty>

Conversion (%) = $C_0 + C_1 \cdot T + C_2 \cdot T^2$
(T in Kelvin)

Stoichiometry **Basis**

Delete Name Rxn-3 Not Ready

Figura 44: Paràmetres a especificar en el HYSYS per una Reacció de Conversió
(Font: HYSYS.Plant)

8.4.2 Equilibri

La constant d'equilibri es pot expressar com:

$$K = \prod_{j=1}^{N_c} [BASE]_{e_j}^{V_j} \quad (8.6)$$

on:

K = és la constant d'equilibri

$[BASE]_{e_j}$ = Composició o concentració del component j en equilibri

V_j = Coeficient estequiomètric pel component j

N_c = Número de components

La constant d'equilibri $\ln(k)$ es pot fixar o calcular com una funció que depèn de la temperatura basada en un número de constants:

$$\ln(keq) = a + b \quad (8.7)$$

on:

$$a = A + \frac{B}{T} + C \cdot \ln(T) + D \cdot T$$

$$b = E \cdot T^2 + F \cdot T^3 + G \cdot T^4 + H \cdot T^5$$

on A, B, C, D, E, F, G, H són constants definides en la taula de Keq.

Equilibrium Reaction: Rxn-1

Ln(Keq) Equation

A	<empty>
B	<empty>
C	<empty>
D	<empty>
E	<empty>
F	<empty>
G	<empty>
H	<empty>

Ln(Keq) = a + b

a = A + B/T + C ln(T) + D T

b = E T² + F T³ + G T⁴ + H T⁵

(T in Kelvin)

Stoichiometry Basis **Keq** Approach Library

Delete Name Rxn-1 Not Ready Ln(K) Eqn

Figura 45: Per una reacció d'equilibri on es calcula la K en funció de la temperatura
(Font: HYSYS.Plant)

Si es fixa la constant d'equilibri, evidentment aquesta passa a ser independent de la temperatura.

Equilibrium Reaction: Rxn-1

Fixed Keq Constant

Keq empty

☐ Log Basis

Stoichiometry Basis **Keq** Approach Library

Delete Name Rxn-1 Not Ready Fixed K

Figura 46: Per una reacció d'equilibri on li dones un valor a la K fixe
(Font: HYSYS.Plant)

Alternativament, es pot donar una taula de valors de la constant d'equilibri versus temperatura i el HYSYS ja calcula automàticament els paràmetres d'equilibri.

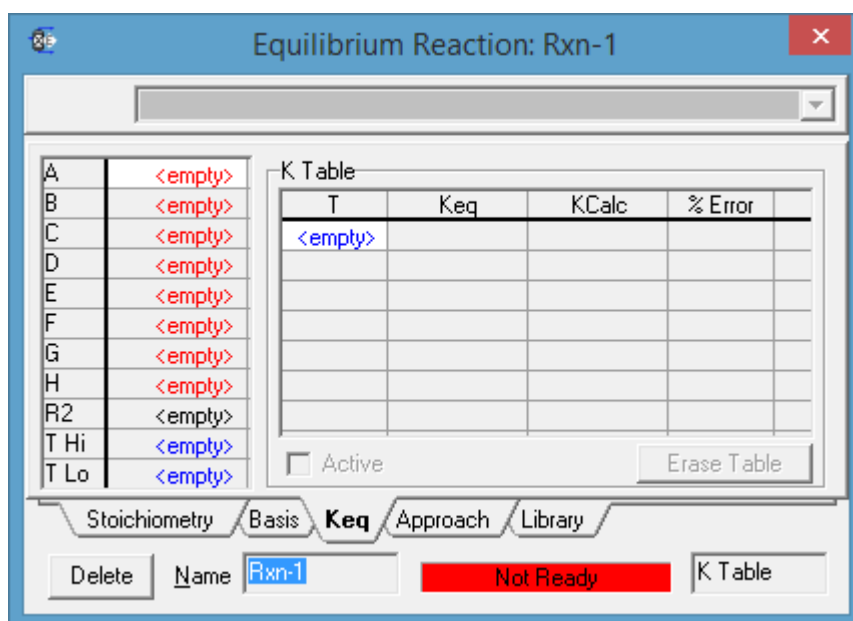


Figura 47: Taula per una reacció d'equilibri on has d'especificar la T i la K
(Font: HYSYS.Plant)

També es pot determinar $\ln(k)$ amb l'energia lliure de Gibbs, aquesta es determina per uns coeficients per gasos ideals de l'energia lliure de Gibbs, que es troba en la llibreria del HYSYS.

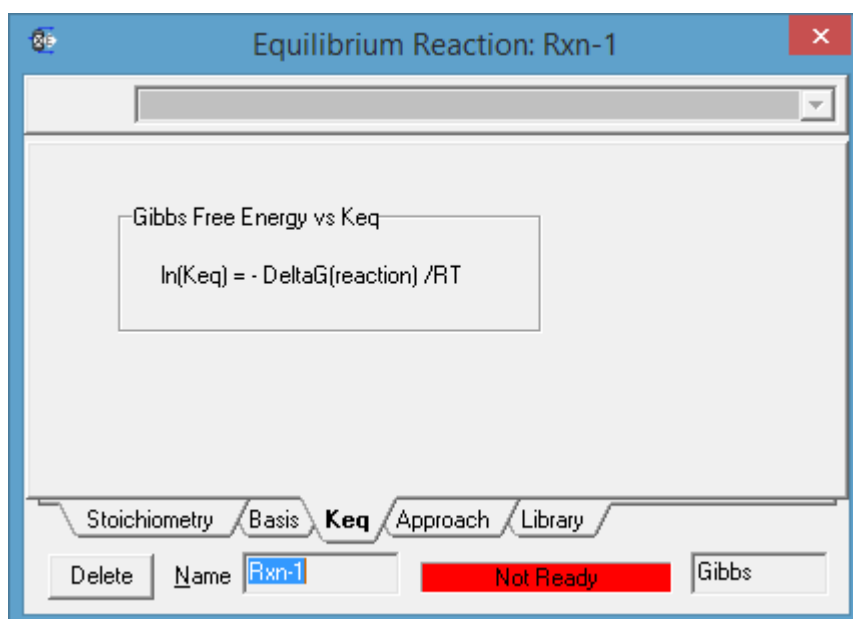


Figura 48: Per una reacció d'equilibri on es calcula la K amb l'energia lliure de Gibbs
(Font: HYSYS.Plant)

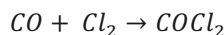
8.4.3 Cinètica

Per una reacció de tipus cinètic:

$$r_A = k \cdot f(BASIS) - k' \cdot f'(BASIS) \quad (8.8)$$

$$F_{A0} - F_a + \int_V r_A dV = \frac{dN_a}{dt} \quad (8.9)$$

Per una reacció com aquesta:



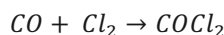
La velocitat cinètica és :

$$r_{CO} = k[CO][Cl_2]^{3/2} \quad (8.10)$$

- Consistència termodinàmica:

És molt important en reaccions inverses que s'aconsegueixi una consistència termodinàmica, si no és així s'obtenen resultats erronis.

Considerant la reacció prèviament mencionada:



la cinètica de la reacció en sentit directe seria:

$$r_{COdirecta} = k[CO][Cl_2]^{3/2} \quad (8.11)$$

Ara suposem que tu vols la reacció inversa, com que la reacció cinètica directa ja es coneix, l'ordre de la reacció inversa ha de derivar d'aquesta i així mantenir la consistència termodinàmica.

$$r_{COinversa} = k'[CO]^\alpha [Cl_2]^\beta [COCl_2]^\gamma \quad (8.12)$$

on α, β, γ representen valors desconeguts de l'ordre dels tres components.

L'equilibri és definit doncs:

$$r_{COdirecta} - r_{COinversa} = 0 \quad (8.13)$$

La constant d'equilibri K és llavors igual a :

$$K = \frac{k}{k'} = \frac{[CO]^\alpha [Cl_2]^\beta [COCl_2]^\gamma}{[CO][Cl_2]^{3/2}} \quad (8.14)$$

La primera equació relaciona la velocitat de reacció del component A amb les constants de reacció i la "BASIS" que correspon a: Pressió parcial, concentració molar, concentració màsica, fracció molar, fracció màsica, la fugacitat o l'activitat.

La segona equació és un balanç molar, per estats estacionaris la part de la dreta de l'igual es fa zero.

Figura 49: Per una reacció cinètica on s'ha d'escollir el BASIS que s'especificarà pels components
(Font: HYSYS.Plant)

Per mantenir la forma de l'equació d'equilibri que s'ha vist amb anterioritat:

$$K = \prod_{j=1}^{N_c} [BASE]_{e_j}^{\nu_j} \quad (8.6)$$

Llavors, K és igual a:

$$K = \frac{[COCl_2]}{[CO] \cdot [Cl_2]} \quad (8.15)$$

Ara es combina les dos relacions per la constant K (8.14) i (8.15) i queda que:

$$\frac{[CO]^\alpha [Cl_2]^\beta [COCl_2]^\gamma}{[CO][Cl_2]^{3/2}} = \frac{[COCl_2]}{[CO] \cdot [Cl_2]}$$

Per mantenir la constància termodinàmica: α ha de ser 0, β ha de ser 0,5 i γ ha de ser 1.

Per altre banda, les constants de velocitat de reacció són funció de la temperatura, d'acord amb la següent forma de l'equació d'Arrhenius:

$$k = A \cdot \exp\left\{-\frac{E}{RT}\right\} \cdot T^\beta \quad (8.16)$$

$$k' = A' \cdot \exp\left\{-\frac{E'}{RT}\right\} \cdot T^{\beta'} \quad (8.17)$$

on:

k = Constant de velocitat per la reacció directa

k' = Constant de velocitat per la reacció inversa

A = Factor de freqüència per la reacció directa

A' = Factor de freqüència per la reacció inversa

E = Energia d'activació per la reacció directa

E' = Energia d'activació per la reacció inversa

β = Constant de velocitat ampliada per la reacció directa

β' = Constant de velocitat ampliada per la reacció inversa

R = Constant dels gasos, el seu valor depèn de les unitats que agafis per l'entalpia molar i la temperatura

T = Temperatura absoluta

Figura 50: Per una reacció cinètica on es calcula la velocitat de reacció amb l'equació d'Arrhenius (Font: HYSYS.Plant)

8.4.4 Catàlisi heterogènia

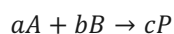
El HYSYS té aquesta opció de reacció quan es tracta d'una reacció cinètica que requereix un catalitzador sòlid.

La velocitat de reacció és expressada per l'equació general de Yang and Hougen (1950):

$$-r = \frac{(\text{kinetic term}) \cdot (\text{potential term})}{(\text{adsorption term})}$$

Des de que aquests tipus de reaccions engloben una reacció a la superfície juntament amb l'absorció (i la desabsorció) dels reactius i els productes, el resultat de la velocitat de reacció s'ha fet fortament dependent a aquests paràmetres.

Considerant la següent reacció simple:



Depenent del mecanisme de reacció, l'expressió de la velocitat de reacció pot variar. En la següent taula es detalla per cadascuna.

Taula 6: Expressions de velocitat de reacció segons el mecanisme de reacció que emprava el HYSYS

LANGMUIR - HINSHELWOOD MODEL	$r = \frac{k_+ K_A K_B C_A C_B}{(1 + K_A C_A + K_B C_B + K_p C_p)^2}$ (8.18)
ELEY – RIDEAL MODEL	$r = \frac{k_+ K_B C_A C_B}{(1 + K_B C_B + K_p C_p)}$ (8.19)
MARS – VAN KREVELEN MODEL	$r = \frac{k C_A}{(1 + (a/b) + (k/k^*) \cdot C_A C_B^{-n})}$ (8.20)

On:

K_x = Constant d'absorció pel component x (A,B,C,D)

k_+ = Constant de velocitat per la reacció directa

k = Constant de velocitat per la oxidació del hidrocarbur

k^* = Constant de velocitat per la reoxidació de la superfície

HYSYS ho fa amb una forma generalitzada, permet a l'usuari utilitzar l'expressió de velocitat que més li interessi:

$$r = \frac{k_f \prod_{i=1} C_i^{\alpha_i} - k_r \prod_{j=1} C_j^{\beta_j}}{(1 + \sum_{k=1}^M \{K_k \prod_{g=1}^M C_g^{\gamma_{kg}}\})^n}$$
(8.21)

On:

k_f i k_r = Constants de velocitat per les reaccions directes i inverses de l'expressió cinètica

K = Constant d'absorció

M = Número de reactius que s'han absorbit i productes i inerts absorbits

Les constant de velocitat provenen de l'equació d'Arrhenius i per tant per cadascuna s'ha de verificar els paràmetres d'Arrhenius (el factor A i l'energia d'activació).

Heterogeneous Catalytic Reaction: Rxn-4

Forward Reaction

A	<empty>
E	<empty>
B	<empty>

Reverse Reaction

A'	<empty>
E'	<empty>
B'	<empty>

Components	Forward Order	Reverse Order
Methanol	0.0000	1.000
AceticAcid	0.0000	1.000
H2O	0.0000	0.0000
M-Acetate	0.0000	0.0000
<empty>		

Stoichiometry Basis **Numerator** Denominator

Delete Name Rxn-4 Not Ready Kinetics Help

Figura 51: Taula que correspon al numerador de l'equació 8.21 per una reacció de catàlisi heterogènia per calcular la velocitat de reacció
(Font: HYSYS.Plant)

Heterogeneous Catalytic Reaction: Rxn-4

Component Exponents

A	E [kJ/kgmole]	Methanol	AceticAcid	H2O	M-A
<empty>	<empty>	<empty>	<empty>	<empty>	<

Denominator Exponent

1

Delete Row

Stoichiometry Basis Numerator **Denominator**

Delete Name Rxn-4 Not Ready Kinetics Help

Figura 52: Taula que correspon al denominador de l'equació 8.21 per una reacció de catàlisi heterogènia per calcular la velocitat de reacció
(Font: HYSYS.Plant)

8.4.5 Reacció simple

Aquest tipus de reacció és molt similar a la reacció cinètica, menys si es produeix la reacció inversa que llavors és semblant a la d'equilibri.

Per la reacció directa, la constant de velocitat de reacció és funció de la temperatura, d'acord amb la següent forma de l'equació d'Arrhenius:

$$k = A \cdot \exp \left\{ -\frac{E}{RT} \right\} \cdot T^{\beta}$$
(8.22)

on:

k = Constant de velocitat

A = Factor de freqüència

E = Energia d'activació

β = Constant de velocitat ampliada

R = Constant dels gasos, el seu valor depèn de les unitats que agafis per l'entalpia molar i la temperatura

T = Temperatura absoluta

Si el coeficient d'Arrhenius A és igual a zero, no hi ha reacció.

Si els coeficients E i β són igual a zero, la constant de velocitat es fixada pel valor de A

Per la reacció inversa, la constant és d'equilibri, és funció de la temperatura i es defineix:

$$\ln K' = A' + \frac{B'}{T} + C' \cdot \ln(T) + D' \cdot T$$
(8.23)

on A', B', C' i D' són constants.

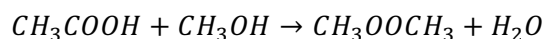
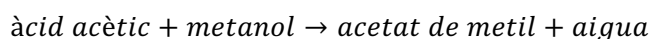
Figura 53: Per una reacció simple on es calcula la velocitat de reacció amb l'equació d'Arrhenius (Font: HYSYS.Plant)

9. ESTUDI D'UNA REACCIÓ D'ESTERIFICACIÓ EN UNA COLUMNA DE DESTIL·LACIÓ AL LABORATORI

L'objectiu d'aquest treball, com ja s'havia esmentat amb anterioritat, és estudiar la destil·lació reactiva, i la seva aplicació en diferents escenaris, però sobretot focalitzant en la determinació experimental d'un procés a escala de laboratori, que posteriorment servirà com a pràctica docent d'Experimentació en Enginyeria Química.

La reacció que es durà a terme és una reacció de d'esterificació. Una reacció d'esterificació es produeix quan un àcid carboxílic reacciona amb un alcohol per formar un ester i aigua.

La reacció que s'estudiarà és aquesta:



Aquesta reacció ha de estar catalitzada per un àcid fort, com pot ser l'àcid sulfúric. Es tracta d'una reacció de segon ordre.

9.1 Importància a nivell industrial

El producte principal que obtenim d'aquesta reacció és l'acetat de metil, a nivell industrial que es realitzi mitjançant la destil·lació reactiva és una gran comoditat, ja que en el procés convencional s'utilitzen múltiples reactors amb un gran excés d'un dels reactius per arribar a obtenir una conversió elevada. El producte, després, és molt difícil de purificar ja que es formen dos azeotrops: acetat de metil-aigua i acetat de metil i metanol.

Diferents mètodes s'han utilitzat per dissociar el azeotrop de l'acetat de metil-metanol, com per exemple, utilitzar columnes de destil·lació amb condicions severes de pressió o de buit, també es poden fer servir les columnes de destil·lació extractiva.

El procés convencional conté dos reactors i vuit columnes de destil·lació, fent un procés complex i econòmicament car.

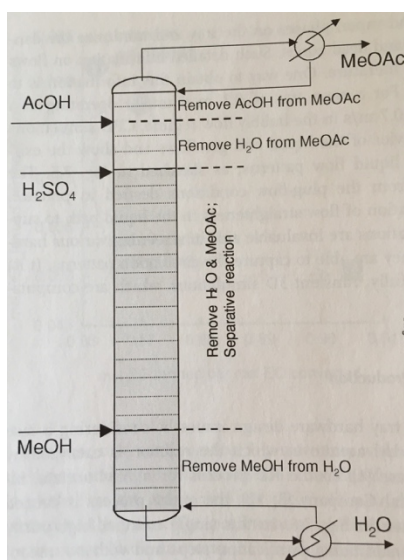


Figura 54: Obtenció d'acetat de metil en una columna de destil·lació reactiva
(Font: Sundmacher, K. Reactive distillation)

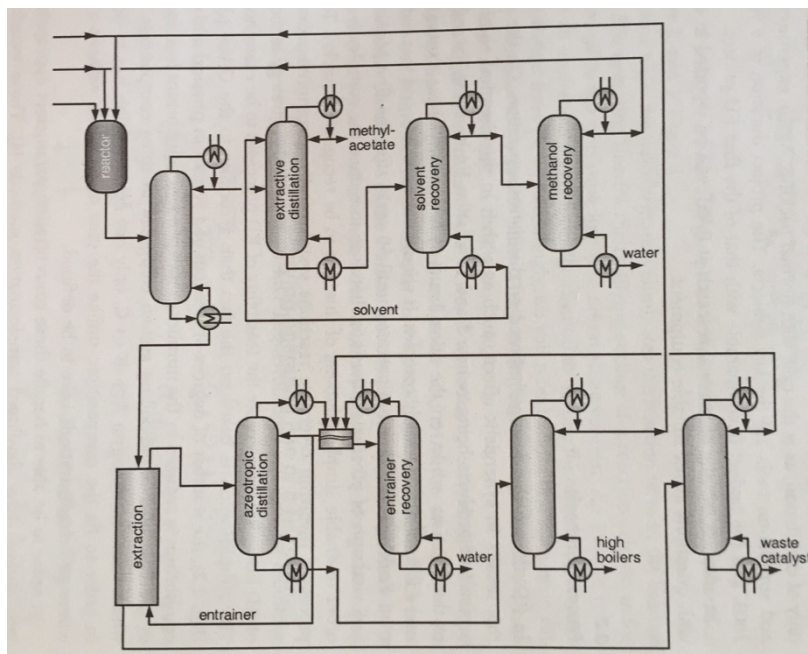


Figura 55: Obtenció d'acetat de metil amb el procés convencional
(Font: Sundmacher, K. Reactive distillation)

També hi ha una altre configuració per la producció d'acetat de metil que evita les possibles inundacions de la columna quan el catalitzador que s'utilitza és líquid.

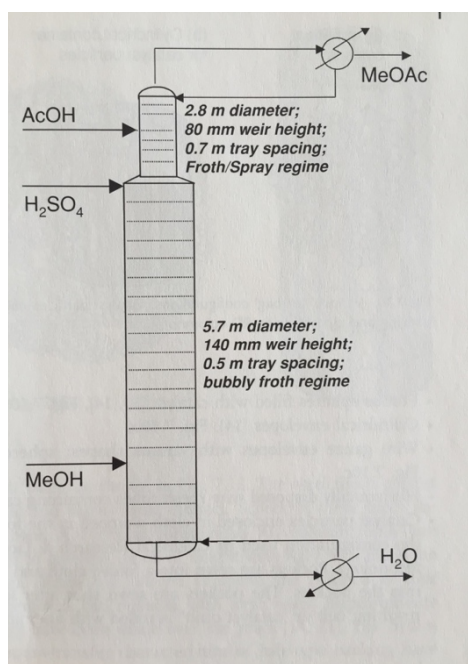


Figura 56: Obtenció d'acetat de metil amb el reducció de diàmetre
(Font: Sundmacher, K. Reactive distillation)

La reducció de diàmetre a la part superior de la columna evita les inundacions que es poden produir, ja que tot i el gran diàmetre de la columna, només un 25% es fa servir per dur a terme la reacció, la resta es per la circulació dels diferents corrents. En molts casos, per evitar que es produeixin inundacions s'ha de minimitzar el cabal del líquid que es fa servir com a catalitzador. Si reduïm el diàmetre de la part superior de la columna, que no ens intervé en la reacció ja que no es la zona reactiva de la columna, evitem les inundacions i a més a més augmenten la velocitat superficial del vapor.

En el procés de destil·lació reactiva s'obté un acetat de metil d'alta puresa i fins i tot ultra-elevada puresa. El fet més interessant és que tot i que la reacció tingui una desfavorable limitació d'equilibri és possible amb una columna de destil·lació reactiva, obtenir unes conversions altíssimes utilitzant un ràtio estequiomètric semblant del metanol i l'àcid acètic.

Aquest procés s'integra en una única columna, prescindint així del complex sistema anterior i reciclant el azeotrop entre el metanol i l'acetat de metil.

En aquesta única columna, es produeix una alta puresa d'acetat de metil sense passos addicionals de purificació i sense recirculacions per reactius que no han reaccionat. Si es va traient l'acetat de metil que ja s'ha format, la conversió augmenta sense tenir un excés de reactius. Pels plats inferiors es situa el corrent del reactiu més lleuger, que és el metanol, en els plats superiors es situa el corrent del reactiu més pesat, l'àcid acètic. La columna té tres seccions. La reacció té lloc majoritàriament en la secció del mig. En la secció de sota, es produeix la separació del metanol amb l'aigua, el metanol retorna a la zona de reactiva. Els vapors surten de la secció reactiva com a azeotrop de metanol i àcid acètic, el qual es trenca en la zona de rectificació, la zona més elevada de la columna, addicionant àcid acètic com a intermediari.

La columna de destil·lació reactiva representa una planta química que costa una cinquena part del que costa el procés convencional i que consumeix una cinquena part del que consumiria procés convencional.

El metil acetat és utilitzat com a intermediari en la producció de varietat de polièsters com el paper fotogràfic, l'acetat de cel·lulosa, etc. Per fabricar cuirs artificials; Com a solvent volàtil de baixa toxicitat en adhesius, pintures, vernissos, en productes de cura personal com el lleva ungles; Com a dissolvent de tot tipus de resines: nitrocel·lulosa, butiral de vinil, isocianat, resines d'urea; Com a desengreixant i neteja de metalls.

9.2 Característiques dels reactius i productes

9.2.1 Metanol

El metanol és el principal component del destil·lat en sec de la fusta. És un dels dissolvents més universals i generalment es troba en aplicacions industrials però també en aplicacions d'ús domèstic.

El metanol pertany a la família dels alcohols, és líquid a temperatura ambient, però la seva temperatura d'ebullició no és elevada. És incolor, la olor i el sabor és molt semblant a la del metanol.

Les utilitats més freqüents són:

- En els processos de síntesis de la indústria química
- Com a solvent industrial
- Com a deshumidificant
- Com a anticongelant
- En els indústries del plàstic
- En les pintures

Per més informació a l'Apèndix A s'adjunta fitxa tècnica del metanol.

9.2.2 Àcid acètic

L'àcid acètic és un àcid que es troba en el vinagre, segons la IUPAC s'anomena àcid etanoic. És el segon àcid carboxílic més senzill després de l'àcid fòrmic o metanoic.

L'àcid acètic pertany a la família dels àcids carboxílics, es troba en estat líquid a temperatura ambient i té una temperatura d'ebullició superior a la de l'aigua. El seu gust i olor són agres i és incolor.

La seva principal aplicació és com a reactiu en química orgànica, com a lligant en química inorgànica i com a metabòlit en la bioquímica. També es utilitza com a substrat, en la seva forma activada, en reaccions catalitzades pels enzims acetil transferases.

Té altres usos interessants com en el cas de l'apicultura, que és utilitzat pel control de les larves i ous de les arnes de la cera, que destrueixen els rucs i en el cas de la medicina, que és utilitzat per detectar si tens el virus del papil·loma humà segons el color de la tinció que doni l'àcid acètic quan es disposa sobre les cèl·lules.

Per més informació a l'Apèndix A s'adjunta fitxa tècnica de l'àcid acètic.

9.2.3 Acetat de Metil

L'acetat de metil també conegut com Etanoat de Metil és un ester carboxilat i la seva utilització principal és com a solvent, tot i que el solvent més comú i que estan molt relacionats és el acetat d'etil.

L'acetat de metil pertany a la família dels esters, es troba en estat líquid a temperatura ambient, tot i que la seva temperatura d'ebullició no és gaire elevada. És un líquid amb una olor agradable i és incolor. És miscible amb hidrocarburs.

La seva aplicació principal és la de solvent volàtil de baixa toxicitat en adhesius, pintures i llevadors de poliments de les ungles.

Per més informació a l'Apèndix A s'adjunta fitxa tècnica de l'acetat de metil.

9.2.4 Aigua

L'aigua és un compost químic format per hidrogen i oxigen. Té infinites aplicacions ja que és un compost que s'empra a tots els àmbits de la indústria, no només la química i és imprescindible per la vida.

L'aigua en estat líquid és inodora, incolora i no té sabor. Tot i que hi ha aigües que segons les substàncies que hi conté pot tenir color i pot fer olor. És l'únic compost es pot trobar en els tres estats de la matèria a les temperatures que es donen a la Terra.

Com he dit les seves aplicacions són infinites, ja que es un compost que en el qual són solubles moltes substàncies, no és tòxic, ni és perjudicial per la salut, al contrari és imprescindible per la vida de tots els éssers vius. També recurs

9.3 Paràmetres físics i químics dels reactius i productes

Taula 7: Paràmetres físics i químics dels reactius i productes

	ÀCID ACÈTIC	METANOL	ACETAT DE METIL	AIGUA
Fórmula	CH_3COOH	CH_3OH	CH_3COOCH_3	H_2O
M (g/mol)	60.05	32.00	74.08	18.02
Cp _l (cal/mol °C)	29.70	19.40	21.70	17.99
Cp _g (cal/mol °C)	15.90	10.49	-	8.02
T _{eb} (K)	391.1	337.7	329.9	373.2
T _{eb} (°C)	118.1	64.7	56.9	100.0
T _f (K)	328.9	175.4	174.3	273.15
T _f (°C)	55.75	-97.6	-98.85	0.0
T _c (K)	594.8	513.2	506.9	647.3
T _c (°C)	321.6	240.1	233.7	374.2
P _c (atm)	57.10	78.5	46.3	218.2
ρ (g/l) a 20°C	1049	792	930	998

Zc	0.201	0.220	0.254	0.229
μ (g/m·s) a 20°C	1.27	0.60	0.41	1.00
ΔH^L_{fo} (Kcal)	-115.71	-57.13	-106.4	-68.31
ΔH^G_{fo} (Kcal)	-103.93	-48.06	-	-57.79
ΔG^L_{fo} (Kcal)	-93.20	-39.87	-	-56.68
ΔG^V_{fo} (Kcal)	-90.03	-38.82	-	-54.63
$S^{o,L}$ (cal/mol K)	38.20	30.14	-	16.71
$S^{o,V}$ (cal/mol K)	67.52	57.29	-	45.10
ΔH_m (kcal/mol)	2.80	0.768	1	1.436
ΔH_v (kcal/mol)	5.66	8.24	7.23	9.717

9.4 Equilibri líquid-vapor àcid acètic i metanol

Les dades d'equilibri per la mescla de metanol- àcid acètic que es mostren a les taules posteriors han estat obtingudes del Dortmund Data Bank (DDB). Són un equip de recerca formats per varies universitats i institucions. Aquest obtenen experimentalment les dades d'equilibri de moltes mescles i les fan disponibles en la seva pàgina web. També pots trobar altres dades d'interès com les propietats de molts components, dades d'equilibri líquid – líquid , entalpies, coeficients d'activitat, etc.

Taula 8: Dades d'equilibri per la mescla metanol- àcid acètic, pel component més volàtil, en el nostre cas el metanol. Aquestes dades s'han obtingut a una pressió de 94.13 kPa.
(Font ddbst.com)

T [K]	x_1 [mol/mol]	y_1 [mol/mol]
388.95	0.00000	0.00000
385.15	0.03700	0.10900
383.05	0.05800	0.16500
378.15	0.10700	0.30300
375.95	0.13700	0.35300
370.55	0.20800	0.49100
367.95	0.25000	0.55600
365.85	0.28000	0.60300
364.85	0.30600	0.63000
359.95	0.38700	0.73500
357.85	0.42700	0.77600
354.85	0.49200	0.83100
353.05	0.51700	0.85300
349.15	0.60100	0.91100
346.85	0.65700	0.93400
344.75	0.71300	0.95100
342.25	0.78500	0.97100
340.45	0.83900	0.98300
339.05	0.88200	0.98900
336.95	0.95900	0.99600
336.15	0.99500	0.99900
336.05	1.00000	1.00000

On X correspon a la fracció líquida i Y correspon a la fracció vapor.

Figura 57: Gràfic de les dades d'equilibri corresponents a la Taula 8.
(Font ddbst.com)

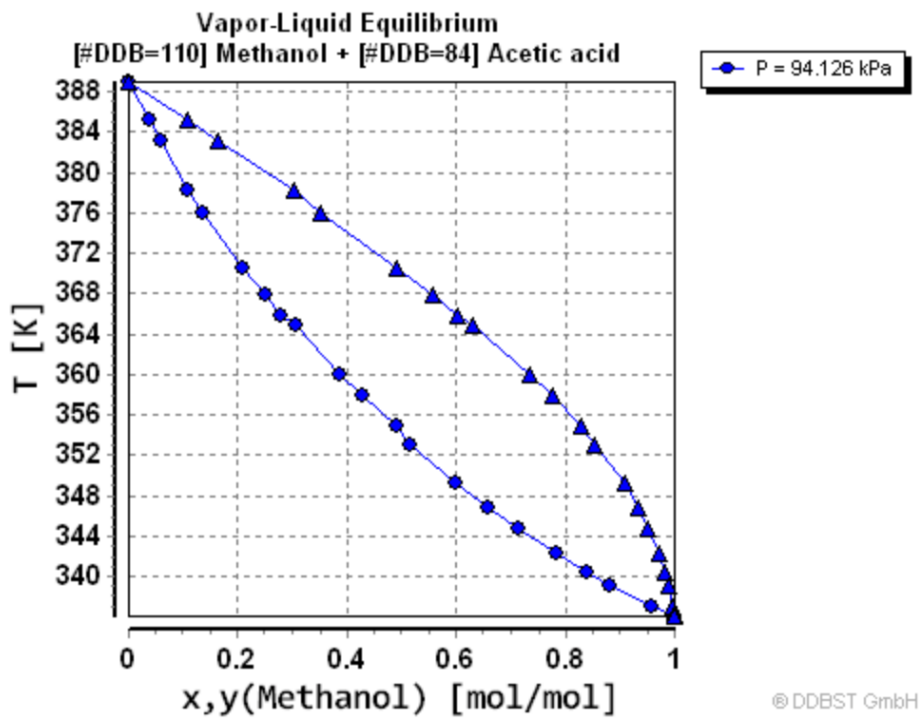
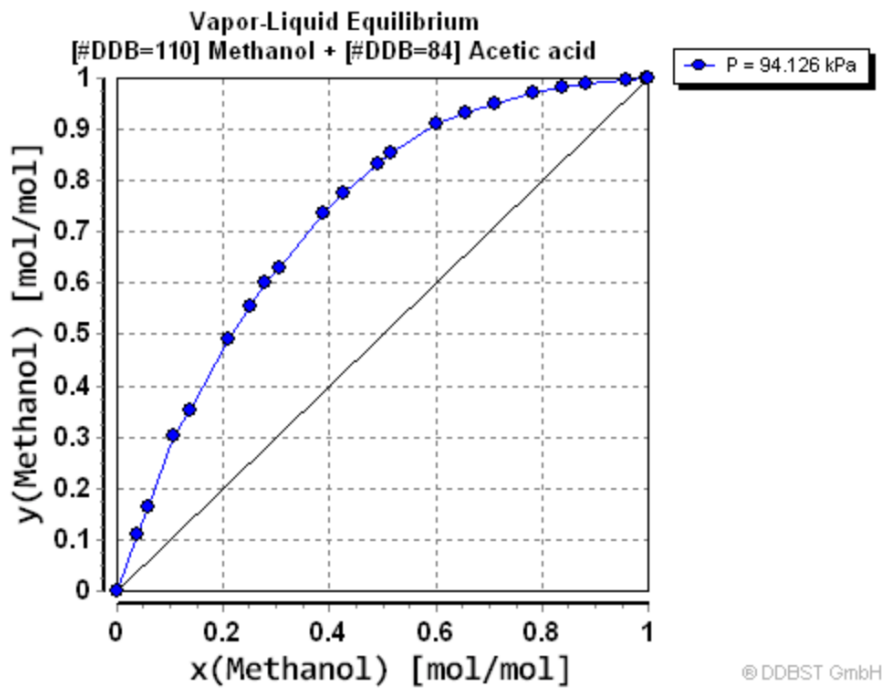


Figura 58: Gràfic de les dades d'equilibri corresponents a la Taula 8
(Font ddbst.com)



9.5 Estudi dels diferents casos de treball en el HYSYS per la destil·lació reactiva a escala industrial

En el HYSYS per una columna amb reacció hi ha diverses configuracions possibles on es poden veure afectats positivament o negativament molts factors, com per exemple: el rendiment, la conversió, la separació, etc. És per això que he fet un estudi de les diverses configuracions possibles, per finalment quedar-me amb la que sigui més apropiada per dur a terme el meu cas.

Abans d'escollir la configuració, haurem de definir uns paràmetres i unes condicions de treball per la columna perquè s'obtingui una conversió i una separació les més elevades possibles, per tant també estudiaré les condicions fins quedar-me amb les que millor resultat s'obtingui.

A l'Apèndix B es detalla pas per pas com desenvolupar una operació de destil·lació reactiva en el HYSYS.

9.5.1 Paràmetres i condicions de treball

Per una columna de destil·lació reactiva es poden variar molts paràmetres i condicions de treball que fan que la conversió del nostre producte sigui més elevada o menys. Per escollir doncs les condicions òptimes he fet un estudi per alguns d'aquests i així poder raonar posteriorment per què he escollit aquestes i no unes altres.

- Cabals de l'aliment

Per estudiar el cabal de l'aliment s'han definit les dades que mostra la taula 9.

Taula 9: Dades que es consideren per estudiar el cabal de l'aliment

PLATS DE LA COLUMNA	38
PLATS DE ZONA REACTIVA	Del plat 34-7
PLATS D'ALIMENTACIÓ	Àcid Acètic → 36 Metanol → 13
TEMPERATURA DE L'ALIMENT	Àcid Acètic → 95°C Metanol → 75 °C
CABAL D'ALIMENTACIÓ	
DIÀMETRE DEL PLAT	El que HYSYS posa per defecte 1.5 m
VOLUM DEL CONDENSADOR	El que HYSYS posa per defecte 2 m ³
VOLUM DEL CALDERÍ	El que HYSYS posa per defecte 2 m ³
PRESSIONS	Condensador → 97 kPa Calderí → 90 kPa
REFLUX	El que HYSYS posa per defecte 2

Amb aquests paràmetres fixes, es varia el cabal de l'aliment i s'observa com afecta en la conversió dels productes.

Taula 10: Resultats obtinguts en l'estudi del cabal

CABAL ÀCID ACÈTIC (kmol/h)	CABAL METANOL (kmol/h)	ACETAT DE METIL	AIGUA
100	100	96.93%	92.62%
100	150	96.89%	62.14%
100	200	96.87%	46.77%
150	100	98.52%	63.37%
200	100	98.87%	47.99%

S'observa que, pel cabal, la millor opció és escollir 100 kmol/h pels dos aliments.

- Temperatures de l'aliment

Per estudiar quina és la temperatura òptima per fer entrar l'aliment a la columna, es treballa amb els paràmetres que es detallen en la taula 11.

Taula 11: Dades que es consideren per estudiar la temperatura de l'entrada de l'aliment

PLATS DE LA COLUMNA	38
PLATS DE ZONA REACTIVA	Del plat 34-7
PLATS D'ALIMENTACIÓ	Àcid Acètic → 36 Metanol → 13
TEMPERATURES D'ALIMENTACIÓ	
CABAL DE ALIMENTACIÓ	Àcid Acètic → 100 kmol/h Metanol → 100 kmol/h
DIÀMETRE DEL PLAT	El que HYSYS posa per defecte 1.5
VOLUM DEL CONDENSADOR	El que HYSYS posa per defecte 2 m ³
VOLUM DEL CALDERÍ	El que HYSYS posa per defecte 2 m ³
PRESSIONS	Condensador → 97 kPa Calderí → 90 Kpa
REFLUX	El que HYSYS posa per defecte 2

Taula 12: Resultats obtinguts quan es varia la temperatura de l'aliment

TEMPERATURA ÀCID ACÈTIC (°C)	TEMPERATURA METANOL (°C)	ACETAT DE METIL	AIGUA
75	55	96.91%	92.61%
80	55	96.93%	92.62%
90	55	96.96%	92.65%
115	55	97.03%	92.71%
115	25	97.03%	92.71%
115	45	97.03%	92.71%
115	65	97.01%	92.69%
80	25	96.93%	92.62%
120	25	91.20%	83.29%

A partir de les proves anteriors deduïm que la temperatura òptima és:

TEMPERATURA ÀCID ACÈTIC	TEMPERATURA METANOL
115°C	25°C

Podríem escollir entre 55 °C i 25 °C pel metanol que dóna el mateix resultat, es millor escollir una temperatura d'alimentació que estigui a temperatura ambient així t'estalvies haver d'escalfar prèviament.

- Número de plats, zona reactiva i plats d'alimentació

Els paràmetres que es fixen per l'estudi de plats són els que es detallen a la taula 13.

Taula 13: Dades que es consideren per l'estudi dels plats

PLATS DE LA COLUMNA	
PLATS DE ZONA REACTIVA	
PLATS D'ALIMENTACIÓ	
TEMPERATURES D'ALIMENTACIÓ	Àcid Acètic → 115 °C Metanol → 25 °C
CABAL DE ALIMENTACIÓ	Àcid Acètic → 100 kmol/h Metanol → 100 kmol/h
DIÀMETRE DEL PLAT	El que HYSYS posa per defecte 1.5 m
VOLUM DEL CONDENSADOR	El que HYSYS posa per defecte 2 m ³
VOLUM DEL CALDERÍ	El que HYSYS posa per defecte 2 m ³
PRESSIONS	Condensador → 97 kPa Calderí → 90 kPa
REFLUX	El que HYSYS posa per defecte 2

Per aquest estudi es varia primer el número de plats i després es varien els plats d'alimentació i els plats de la zona reactiva.

Taula 14: Resultats per la variació del nombre de plats

NÚMERO DE PLATS	PLATS D'ALIMENTACIÓ	PLATS DE LA ZONA REACTIVA	ACETAT DE METIL	AIGUA
38	Àcid Acètic → 36 Metanol → 13	37-4	97.03%	92.71%
40	Àcid Acètic → 36 Metanol → 13	37-4	No convergeix	No convergeix
35	Àcid Acètic → 31 Metanol → 8	34-4	97.22%	93.97%
30	Àcid Acètic → 28 Metanol → 5	29-3	96.96%	92.64%

Taula 15: Resultats de l'estudi de plats considerant 35 plats totals

NÚMERO DE PLATS	PLATS D'ALIMENTACIÓ	PLATS DE LA ZONA REACTIVA	ACETAT DE METIL	AIGUA
	Àcid Acètic → 31 Metanol → 8	34-4	97.22%	93.97%
	Àcid Acètic → 31 Metanol → 8	34-3	97.23%	93.38%
	Àcid Acètic → 31 Metanol → 5	34-3	97.42%	93.56%
35	Àcid Acètic → 31 Metanol → 4	34-3	97.45%	93.66%
	Àcid Acètic → 31 Metanol → 3	34-3	97.47%	93.62%
	Àcid Acètic → 33 Metanol → 3	34-3	97.36%	93.10%
	Àcid Acètic → 29 Metanol → 3	34-3	97.34%	93.52%

- Diàmetre de plat

El diàmetre de plat que estipula el HYSYS per defecte és 1.5 m, s'han fet algunes proves i canviant el diàmetre, varia molt poc o a vegades gens el resultat. Per tant es deixa com a diàmetre de plat 1.5m.

DIÀMETRE DE PLAT	1.5 m
------------------	-------

- Volum del condensador

El volum del condensador que el HYSYS dona per defecte són 2m³, s'han fet algunes proves i canviant aquest volum no afecta gens al resultat. Per tant es deixa com a volum del condensador 2 m³.

VOLUM DEL CONDENSADOR	2 m ³
-----------------------	------------------

- Volum del Calderí

El volum del calderí que el HYSYS dona per defecte són 2m³, s'han fet algunes proves i canviant el aquest volum no afecta gens al resultat. Per tant es deixa com a volum del calderí 2 m³.

VOLUM DEL CALDERÍ	2 m ³
-------------------	------------------

- Pressions en el condensador i calderí

Els paràmetres que es fixen per l'estudi de les pressions són les que es detallen a la taula 16.

Taula 16: Dades que es consideren per l'estudi de pressions en la columna

PLATS DE LA COLUMNA	35
PLATS DE ZONA REACTIVA	Del plat 34-3
PLATS D'ALIMENTACIÓ	Àcid Acètic → 31 Metanol → 3
TEMPERATURES D'ALIMENTACIÓ	Àcid Acètic → 115 °C Metanol → 25 °C
CABAL DE ALIMENTACIÓ	Àcid Acètic → 100 kmol/h Metanol → 100 kmol/h

DIÀMETRE DEL PLAT	1.5 m
VOLUM DEL CONDENSADOR	2 m ³
VOLUM DEL CALDERÍ	2 m ³
PRESSIONS	Condensador → - Calderí → -
REFLUX	El que HYSYS posa per defecte 2

Per aquest estudi es varien les pressions en el calderí i en el condensador.

Taula 17: Resultats que s'obtenen variant la pressió del calderí i el condensador

PRESSIÓ EN EL CONDENSADOR (kPa)	PRESSIÓ EN EL CALDERÍ (kPa)	ACETAT DE METIL	AIGUA
97	90	97.47%	93.62%
101	101	97.24%	93.39%
101	120	96.67%	93.12%
101	130	96.83%	92.98%
101	90	97.41%	93.55%
150	110	96.40%	92.53%
150	101	96.54%	92.67%
170	110	96.13%	92.25%
101	80	97.57%	93.71%
101	70	97.72%	93.86%

Tot i que hi ha resultats més elevats (ombrejats en blau), per treballar en el laboratori i no tenir problemes per establir una pressió per sota d'1 atmosfera, s'escull les pressions de 101 kPa per ambdós.

S'ha vist que si es disminueix molt més la pressió, sobretot en el calderí, es pot arribar a una puresa de >99.9% d'acetat de metil, però és molt complicat establir aquestes pressions i ho és encara més quan es tracta de portar-ho a terme en un laboratori.

- Reflux

Paràmetres fixats per estudiar el reflux es detallen a la taula 18.

Taula 18: Dades que es consideren per l'estudi del reflux

PLATS DE LA COLUMNA	35
PLATS DE ZONA REACTIVA	Del plat 34-3
PLATS D'ALIMENTACIÓ	Àcid Acètic → 31 Metanol → 3
TEMPERATURES D'ALIMENTACIÓ	Àcid Acètic → 115 °C Metanol → 25 °C
CABAL DE ALIMENTACIÓ	Àcid Acètic → 100 kmol/h Metanol → 100 kmol/h
DIÀMETRE DEL PLAT	1.5 m
VOLUM DEL CONDENSADOR	2 m ³
VOLUM DEL CALDERÍ	2 m ³
PRESSIONS	Condensador → 101 kPa Calderí → 101 kPa
REFLUX	-

Es tracta d'anar variant el reflux i observar els resultats què s'obtenen.

Taula 19: Resultats de l'estudi de la variació de reflux

REFLUX	ACETAT DE METIL	AIGUA
2,0	97.24%	93.39%
1,5	91.74%	87.65%
1,0	81.43%	71.83%
2,5	96.54%	92.72%
3,0	95.40%	91.62%

Per tant, segons els resultats, s'agafa 2 com a reflux.

Conclusió

Després de l'estudi realitzat, treballarem amb les condicions que s'especifiquen en la taula 20.

Taula 20: Condicions de treball definitives per la columna reactiva en el HYSYS

PLATS DE LA COLUMNA	35
PLATS DE ZONA REACTIVA	Del plat 34-3
PLATS D'ALIMENTACIÓ	Àcid Acètic → 31 Metanol → 3
TEMPERATURES D'ALIMENTACIÓ	Àcid Acètic → 115 °C Metanol → 25 °C
CABAL DE ALIMENTACIÓ	Àcid Acètic → 100 kmol/h Metanol → 100 kmol/h
DIÀMETRE DEL PLAT	1.5 m
VOLUM DEL CONDENSADOR	2 m ³
VOLUM DEL CALDERÍ	2 m ³
PRESSIONS	Condensador → 101 kPa Calderí → 101 kPa
REFLUX	2

9.5.2 Configuracions possibles

Com s'ha comentat amb anterioritat, en el HYSYS per la destil·lació reactiva es pot treballar amb diverses configuracions que a continuació es detallen i es fa un estudi que després ens serà útil per descartar unes configuracions i escollir unes altres.

Les condicions de treball i paràmetres amb que es treballaran són les que s'han detallat a la taula 20 de l'apartat anterior.

- Una única columna amb un corrent d'alimentació

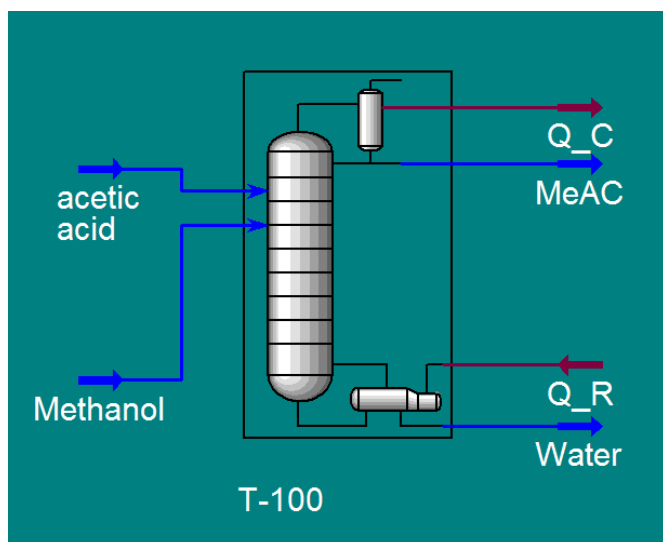


Figura 59: Columna Reactiva amb l'aliment en el mateix plat
(Font: HYSYS.Plant)

En aquesta configuració l'únic que s'ha de tenir en compte és que els corrents dels dos aliments entrin en el mateix plat, la resta del procés és el mateix que es detalla en l'apèndix B.

Inlet Streams	
Stream	Inlet Stage
acetic acid	17_Main 1
Methanol	17_Main 1
<< Stream >>	

Figura 60: Taula on s'ha especificat el plat on entren els corrents d'alimentació
(Font: HYSYS.Plant)

Es pot posar el plat d'aliment que es vulgui o millor dit, el plat amb què s'obtingui millor resultat, per tant s'han fet diversos estudis pel plat d'entrada de l'aliment i s'han comparat els resultats.

Taula 21: Resultats per l'aliment en un únic plat

PLAT D'ALIMENTACIÓ	ACETAT DE METIL	AIGUA
13	79.96%	76.83%
8	79.98%	76.85%
23	77.85%	74.80%
30	77.54%	74.50%

Si es volgués escollir aquesta configuració, segons els resultats de la taula 21, l'alimentació ha de ser en els plats superiors de la columna per obtenir un millor resultat.

- Una única columna amb dos corrents d'alimentació

Aquesta configuració és idèntica a la que ja s'ha detallat al començament d'aquest apartat, on s'han explicat pas a pas els passos a seguir per dur a terme una columna reactiva amb el HYSYS, per tant els passos són els mateixos.

Per les condicions especificades abans, els resultats que obtenim són:

ACETAT DE METIL	AIGUA
97.24%	93.39%

- Una única columna amb corrents laterals

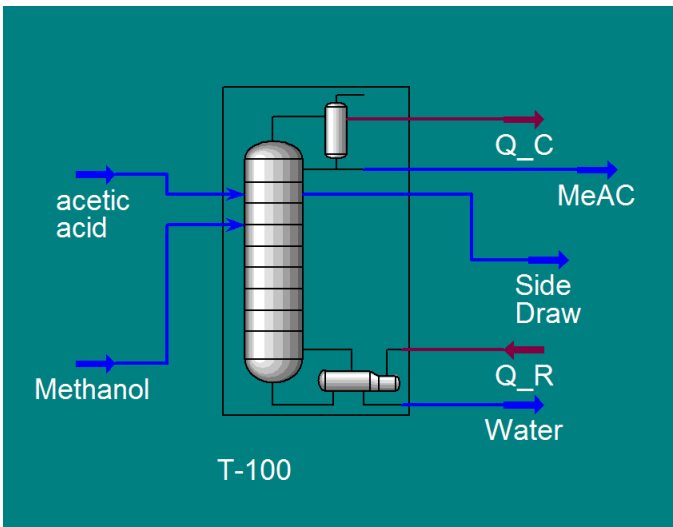


Figura 61: Columna reactiva amb corrents laterals
(Font: HYSYS.Plant)

Per aquesta configuració s'han d'especificar els corrents laterals, com també s'ha d'especificar en quin estat es trobaran aquests, en vapor o en líquid. Per la resta, els passos són idèntics que els detallats en l'apèndix B.

Optional Side Draws			
Stream	Type	Draw Stage	
Side Draw	L	13_Main T	
<< Stream >>			

Figura 62: Taula a completar pels corrents laterals. On posa "Type" és on s'ha d'especificar en quin estat sortirà el corrent lateral
(Font: HYSYS.Plant)

Els resultats que s'obtenen varien segons la naturalesa del corrent lateral, segons en quin plat es situï aquest corrent i també pel cabal del mateix corrent.

Taula 22: Resultats obtinguts amb corrents laterals

NATURALESA DEL CORRENT	CABAL	PLAT DE SITUACIÓ DEL CORRENT LATERAL	ACETAT DE METIL	AIGUA
Líquid	30 kmol/h	13	99.73%	99.95%
		17	99.44%	99.95%
		23	97.90%	99.96%
		30	84.75%	99.97%
Vapor	30 kmol/h	13	82.58%	99.98%
		17	82.58%	99.98%
		23	82.57%	99.98%
		30	82.44%	99.98%

El millor resultat s'obté quan s'escull que el corrent lateral sigui líquid i es situï en el plat número 13. Amb aquestes condicions, ara es varia el cabal.

Taula 23: Resultats amb corrents laterals, considerant que la naturalesa del corrent és líquid i que surt pel plat 13

NATURALESA DEL CORRENT	PLAT DE SITUACIÓ DEL CORRENT LATERAL	CABAL	ACETAT DE METIL	AIGUA
Líquid	13	30 kmol/h	99.73%	99.95%
		25 kmol/h	99.74%	99.95%
		20 kmol/h	99.74%	99.95%
		15 kmol/h	99.75%	99.94%
		35 kmol/h	99.64%	99.96%
		40 kmol/h	84.96%	99.98%

Taula 24: Resultats finals per corrents laterals

NATURALESA DEL CORRENT	PLAT DE SITUACIÓ DEL CORRENT LATERAL	CABAL	ACETAT DE METIL	AIGUA
Líquid	13	15 kmol/h	99.75%	99.94%

- Una única columna amb condensador parcial

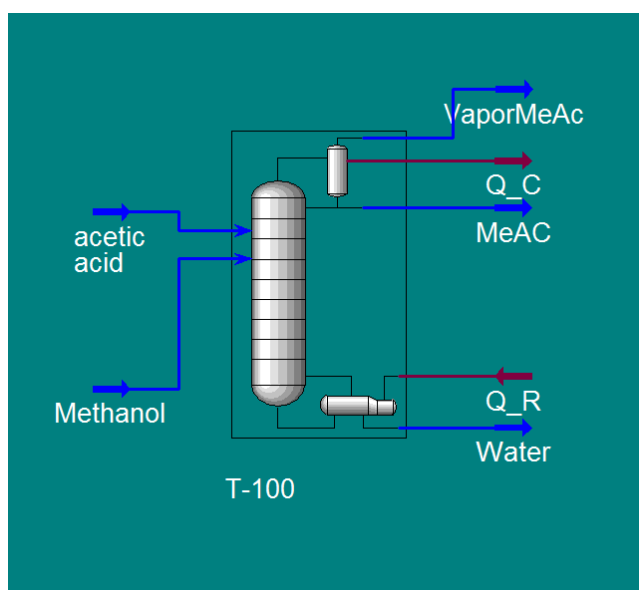


Figura 63: Columna reactiva amb condensador parcial
(Font: HYSYS.Plant)

Per aquesta configuració s’ha d’especificar que el condensador és parcial, com també s’ha d’especificar quin cabal es derivarà i quina variació de pressió hi haurà, la resta del procés és el mateix que s’ha detallat a l’apèndix B.

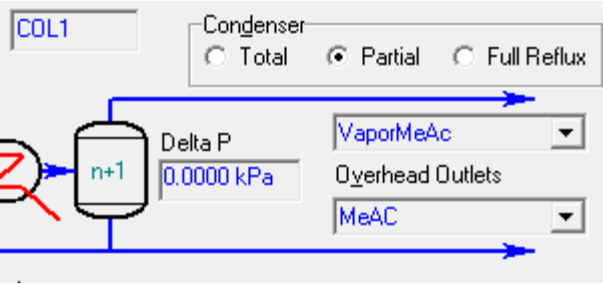


Figura 64: Dades a especificar quan el condensador és parcial
(Font: HYSYS.Plant)

Els resultats varien segons la variació de pressió i el cabal que s’especifiquen, per determinar les millors condicions s’ha canviat el cabal amb una variació de pressió fixa i després es varia la diferència de pressió amb un determinat cabal.

Taula 25: Resultats amb condensador parcial determinant una variació de pressió fixa

ΔP	CABAL	ACETAT DE METIL	AIGUA
7 kPa	5 kmol/h	82.57%	83.74%
	10 kmol/h	85.54%	88.15%
	20 kmol/h	87.03%	91.19%
	30 kmol/h	87.18%	92.74%
	40 kmol/h	87.09%	94.72%

El millor resultat s’obté amb un cabal de 30 kmol/h, per tant ara amb aquest cabal fixe es varia la variació de pressió.

Taula 26: Resultats amb condensador parcial amb cabal fixe

CABAL	ΔP	ACETAT DE METIL	AIGUA
30 kmol/h	7 kPa	87.18%	92.74%
	15 kPa	86.79%	91.28%
	3 kPa	87.43%	93.70%
	0 kPa	87.66%	94.61%

Taula 27: Resultats finals quan es treballa amb condensador parcial

ΔP	CABAL	ACETAT DE METIL	AIGUA
0 kPa	30 kmol/h	87.66%	94.61%

- Reactor + columna de destil·lació

Per dur a terme aquesta configuració en el HYSYS no es fa igual que amb les anteriors, aquí s'ha de posar un reactor que es on tindrà la reacció i després una columna de destil·lació que no sigui reactiva. Els passos a seguir són molt semblants, la única diferència és que la reacció s'ha de concretar dins del reactor i la columna únicament separa els productes obtinguts en el reactor.

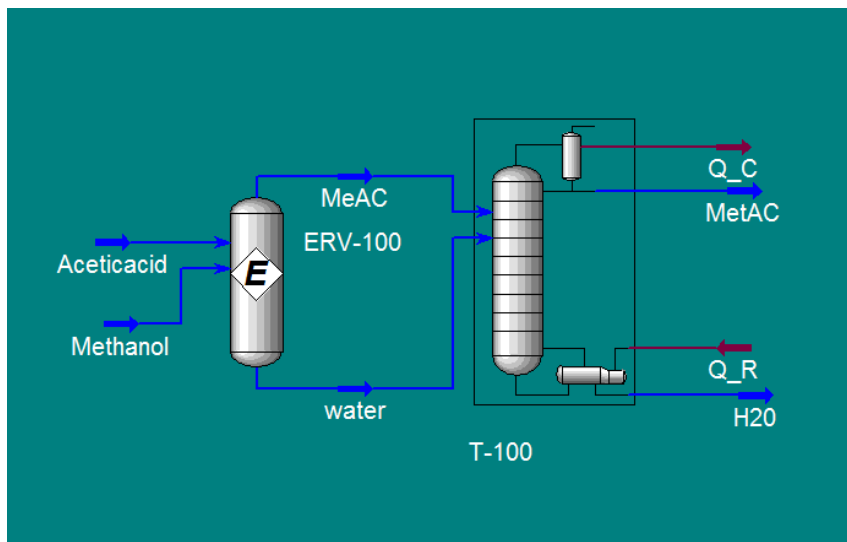


Figura 65: Reactor + Columna de destil·lació
(Font: HYSYS.Plant)

Taula 28: Resultats per Reactor + Columna de destil·lació

ACETAT DE METIL	AIGUA
78.56%	85.53%

Podem concloure doncs, després de veure les diferents configuracions de columna possibles per dur a terme una operació de destil·lació reactiva, que la que més rendiment té i més bona conversió s'obté és la columna reactiva amb corrents laterals. Això és perquè es va traient una proporció de producte a mesura que es va formant, segons el principi de Le-Chatelier qualsevol pertorbació en l'equilibri de la reacció fa que tendeixi a anar cap a la dreta o a l'esquerra, en aquest cas estem traient producte i per tant disminuint la seva concentració, això fa que la reacció tendeixi anar cap a la dreta, és a dir cap als productes, fent que la conversió sigui més elevada.

Pel que fa les altres configuracions tenen rendiments més baixos, tot i que la columna amb dos corrents d'alimentació també s'obtenen bons resultats.

Tot i que amb la configuració de corrents laterals tenim millors resultats, com a configuració definitiva agafo la columna reactiva amb dos corrents d'alimentació amb condensador total, ja que el nostre objectiu és dur aquesta columna al laboratori i no ens interessa tant la complexitat de la columna sinó el resultat final.

9.6 Configuració i condicions d'operació pel nostre estudi a escala industrial

Finalment, tal com s'ha detallat en els apartats anteriors per cada estudi pel que fa les condicions d'operació i la configuració, s'escull:

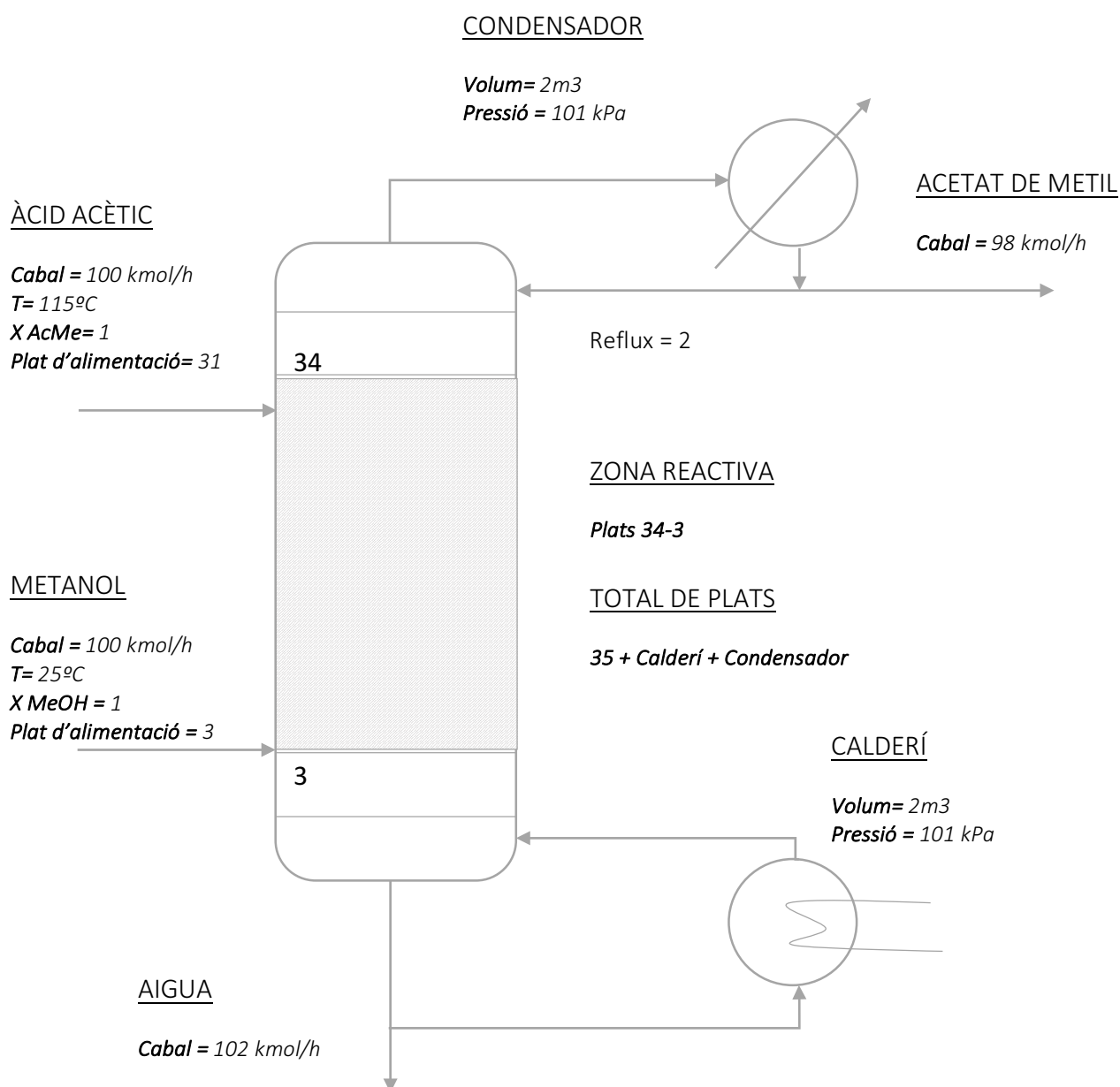


Figura 66: Condicions d'operació i paràmetres de la columna reactiva dissenyada en el HYSYS a escala industrial (Font: Elaboració pròpia)

9.6.1 Característiques dels plats

Taula 29: Característiques dels plats

Diàmetre del plat	1.5 m
Altura del plat	0.55 m
Distància entre plats	0.05 m
Àrea del plat	1.767 m ²
Volum del plat	0.972 m ³

Amb el HYSYS es pot escollir entre plats perforats, de vàlvula o de barboteig però els resultats que obteníem eren molt semblants.

9.6.2 Característiques del condensador

El condensador amb que treballa la columna té forma cilíndrica i està disposat verticalment.

Taula 30: Dimensions del condensador

Volum del condensador	2 m ³
Altura del condensador	1.789 m
Diàmetre del condensador	1.193 m

El HYSYS et dóna a escollir entre un condensador esfèric o cilíndric i la seva disposició, entre horitzontal o vertical. Per defecte et dóna el que finalment s'ha escollit. Els resultats no varien si esculls un o altre, tampoc es veuen afectats amb la seva disposició.

Pel que fa la calor que cal extreure-li:

Q Condensador	8932550 kJ/h
----------------------	---------------------

9.6.3 Característiques del calderí

El calderí amb que treballa la columna té forma cilíndrica i està disposat horitzontalment.

Taula 31: Dimensions del calderí

Volum del calderí	2 m ³
Altura del calderí	1.789 m
Diàmetre del calderí	1.193 m

Com en el cas del condensador, el HYSYS et dóna a escollir entre un calderí esfèric o cilíndric i la seva disposició, entre horitzontal o vertical. Per defecte et dóna el que finalment s'ha escollit. Els resultats no varien si esculls un o altre, tampoc es veuen afectats amb la seva disposició.

Pel que fa la calor que cal aportar-li:

Q Calderí	8226000 kJ/h
------------------	---------------------

Finalment la columna de destil·lació es pot veure, tal com mostra la Figura 67, en el programa de simulació:

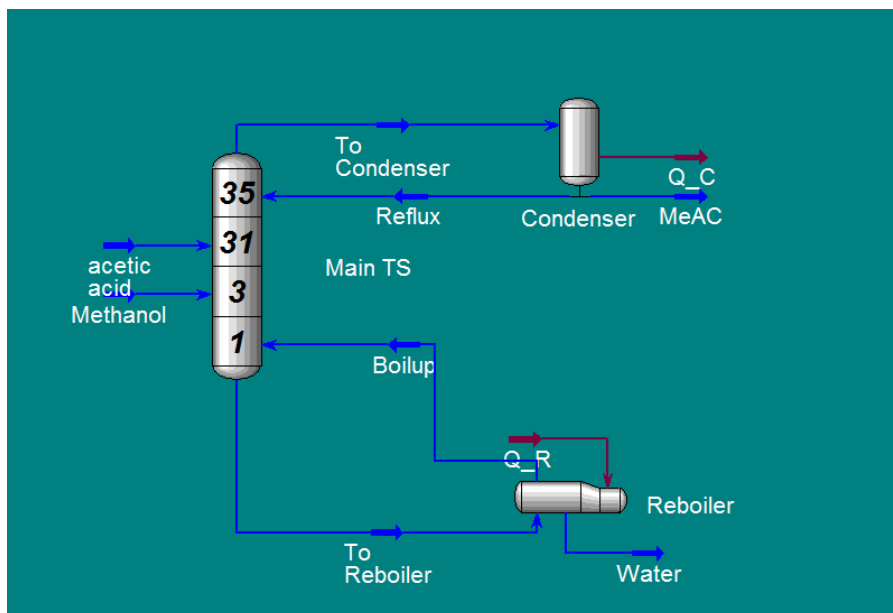


Figura 67: La Columna de Destil·lació reactiva definitiva en el HYSYS
(Font: HYSYS.Plant)

9.7 Resultats obtinguts HYSYS per la columna a escala industrial

9.7.1 Composicions

Stages	Methanol (Light)	H2O (Light)	AceticAcid (Light)	M-Acetate (Light)
Condenser	0.0270	0.0004	0.0002	0.9724
35 Main TS	0.0140	0.0002	0.0013	0.9844
34 Main TS	0.0095	0.0002	0.0068	0.9835
33 Main TS	0.0079	0.0006	0.0292	0.9623
32 Main TS	0.0072	0.0025	0.1287	0.8616
31 Main TS	0.0041	0.0089	0.4313	0.5557
30 Main TS	0.0059	0.0130	0.4312	0.5500
29 Main TS	0.0075	0.0166	0.4310	0.5449
28 Main TS	0.0089	0.0200	0.4309	0.5402
27 Main TS	0.0103	0.0231	0.4307	0.5359
26 Main TS	0.0115	0.0261	0.4306	0.5318
25 Main TS	0.0127	0.0290	0.4305	0.5279
24 Main TS	0.0138	0.0318	0.4304	0.5240
23 Main TS	0.0149	0.0346	0.4303	0.5203
22 Main TS	0.0160	0.0374	0.4301	0.5165
21 Main TS	0.0171	0.0403	0.4300	0.5126
20 Main TS	0.0182	0.0433	0.4299	0.5086
19 Main TS	0.0194	0.0464	0.4298	0.5044
18 Main TS	0.0206	0.0498	0.4297	0.4999
17 Main TS	0.0219	0.0535	0.4296	0.4950
16 Main TS	0.0233	0.0576	0.4295	0.4896
15 Main TS	0.0248	0.0622	0.4295	0.4835
14 Main TS	0.0265	0.0675	0.4294	0.4765
13 Main TS	0.0285	0.0739	0.4295	0.4682
12 Main TS	0.0307	0.0816	0.4296	0.4582
11 Main TS	0.0333	0.0913	0.4296	0.4458
10 Main TS	0.0365	0.1040	0.4293	0.4302
9 Main TS	0.0406	0.1212	0.4273	0.4109
8 Main TS	0.0466	0.1460	0.4205	0.3869
7 Main TS	0.0569	0.1844	0.4019	0.3568
6 Main TS	0.0782	0.2517	0.3560	0.3140
5 Main TS	0.1295	0.3829	0.2561	0.2315
4 Main TS	0.2353	0.5578	0.1102	0.0966
3 Main TS	0.4039	0.5498	0.0228	0.0235
2 Main TS	0.2359	0.7262	0.0356	0.0023
1 Main TS	0.0822	0.8721	0.0456	0.0001
Reboiler	0.0202	0.9339	0.0459	0.0000

Figura 68: Taula de composicions de cada component plat per plat
(Font: HYSYS.Plant)

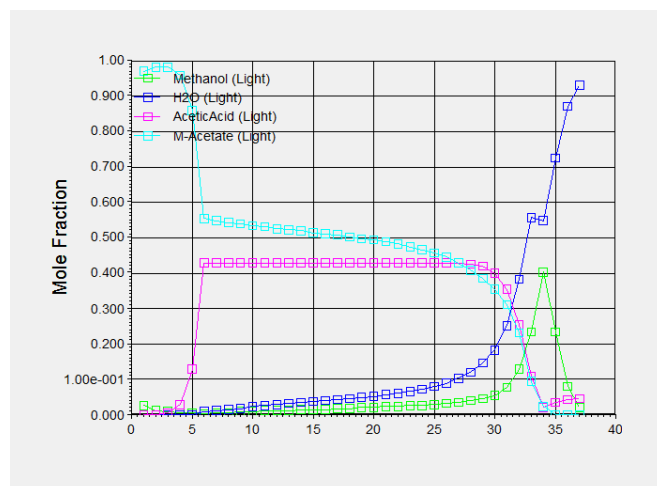


Figura 69: Gràfic de les composicions de cada component plat per plat
(Font: HYSYS.Plant)

9.7.2 Temperatures

	Temp.
Condenser	56.10
35_Main TS	56.45
34_Main TS	56.71
33_Main TS	57.30
32_Main TS	59.77
31_Main TS	69.79
30_Main TS	69.77
29_Main TS	69.76
28_Main TS	69.75
27_Main TS	69.75
26_Main TS	69.74
25_Main TS	69.74
24_Main TS	69.75
23_Main TS	69.75
22_Main TS	69.76
21_Main TS	69.76
20_Main TS	69.78
19_Main TS	69.79
18_Main TS	69.81
17_Main TS	69.83
16_Main TS	69.86
15_Main TS	69.90
14_Main TS	69.95
13_Main TS	70.02
12_Main TS	70.12
11_Main TS	70.26
10_Main TS	70.44
9_Main TS	70.65
8_Main TS	70.80
7_Main TS	70.72
6_Main TS	70.06
5_Main TS	68.73
4_Main TS	68.49
3_Main TS	70.38
2_Main TS	79.99
1_Main TS	90.28
Reboiler	96.84

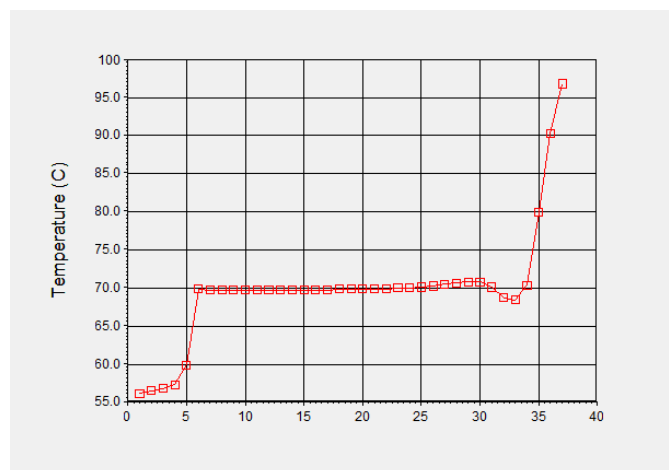


Figura 71: Evolució de les temperatures plat per plat
(Font: HYSYS. Plant)

Figura 70: Taula de temperatures de la columna plat per plat
(Font: HYSYS. Plant)

9.7.3 Pressions

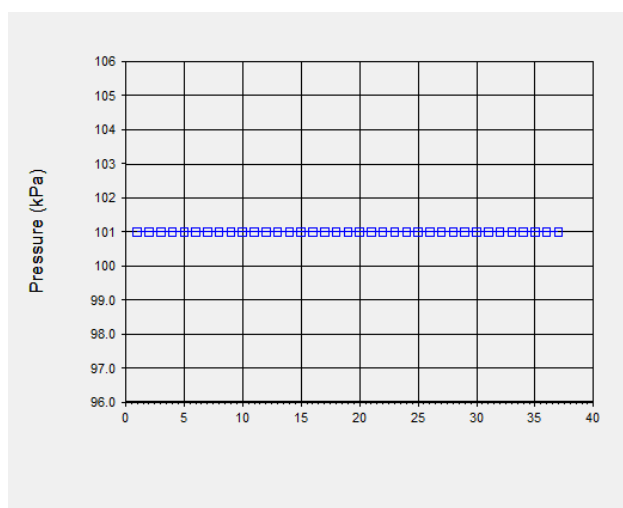


Figura 72: Evolució de la pressió plat per plat
(Font HYSYS.Plant)

9.7.4 Cabals de líquid i Cabals de vapor

	Temp. [C]	Press [kPa]	Liquid [kgmole/h]	Vapour [kgmole/h]
Condenser	56.10	101.0	196.000	
35_Main TS	56.45	101.0	196.636	294.000
34_Main TS	56.71	101.0	196.721	294.636
33_Main TS	57.30	101.0	195.923	294.721
32_Main TS	59.77	101.0	192.882	293.923
31_Main TS	69.79	101.0	285.585	290.882
30_Main TS	69.77	101.0	284.944	283.585
29_Main TS	69.76	101.0	284.376	282.944
28_Main TS	69.75	101.0	283.862	282.376
27_Main TS	69.75	101.0	283.386	281.862
26_Main TS	69.74	101.0	282.939	281.386
25_Main TS	69.74	101.0	282.510	280.939
24_Main TS	69.75	101.0	282.094	280.510
23_Main TS	69.75	101.0	281.683	280.094
22_Main TS	69.76	101.0	281.272	279.683
21_Main TS	69.76	101.0	280.854	279.272
20_Main TS	69.78	101.0	280.424	278.854
19_Main TS	69.79	101.0	279.974	278.424
18_Main TS	69.81	101.0	279.495	277.974
17_Main TS	69.83	101.0	278.978	277.495
16_Main TS	69.86	101.0	278.409	276.978
15_Main TS	69.90	101.0	277.773	276.409
14_Main TS	69.95	101.0	277.055	275.773
13_Main TS	70.02	101.0	276.217	275.055
12_Main TS	70.12	101.0	275.211	274.217
11_Main TS	70.26	101.0	274.017	273.211
10_Main TS	70.44	101.0	272.400	272.017
9_Main TS	70.65	101.0	270.249	270.400
8_Main TS	70.80	101.0	267.187	268.249
7_Main TS	70.72	101.0	262.355	265.187
6_Main TS	70.06	101.0	253.632	260.355
5_Main TS	68.73	101.0	236.940	251.632
4_Main TS	68.49	101.0	217.172	234.940
3_Main TS	70.38	101.0	315.183	215.172
2_Main TS	79.99	101.0	310.154	213.183
1_Main TS	90.28	101.0	307.965	208.154
Reboiler	96.84	101.0		205.965

Figura 73: Taula de Cabals de vapor i Cabals de líquid plat per plat, juntament amb les temperatures i les pressions
(Font: HYSYS.Plant)

9.7.5 Resultats finals per la columna a escala industrial

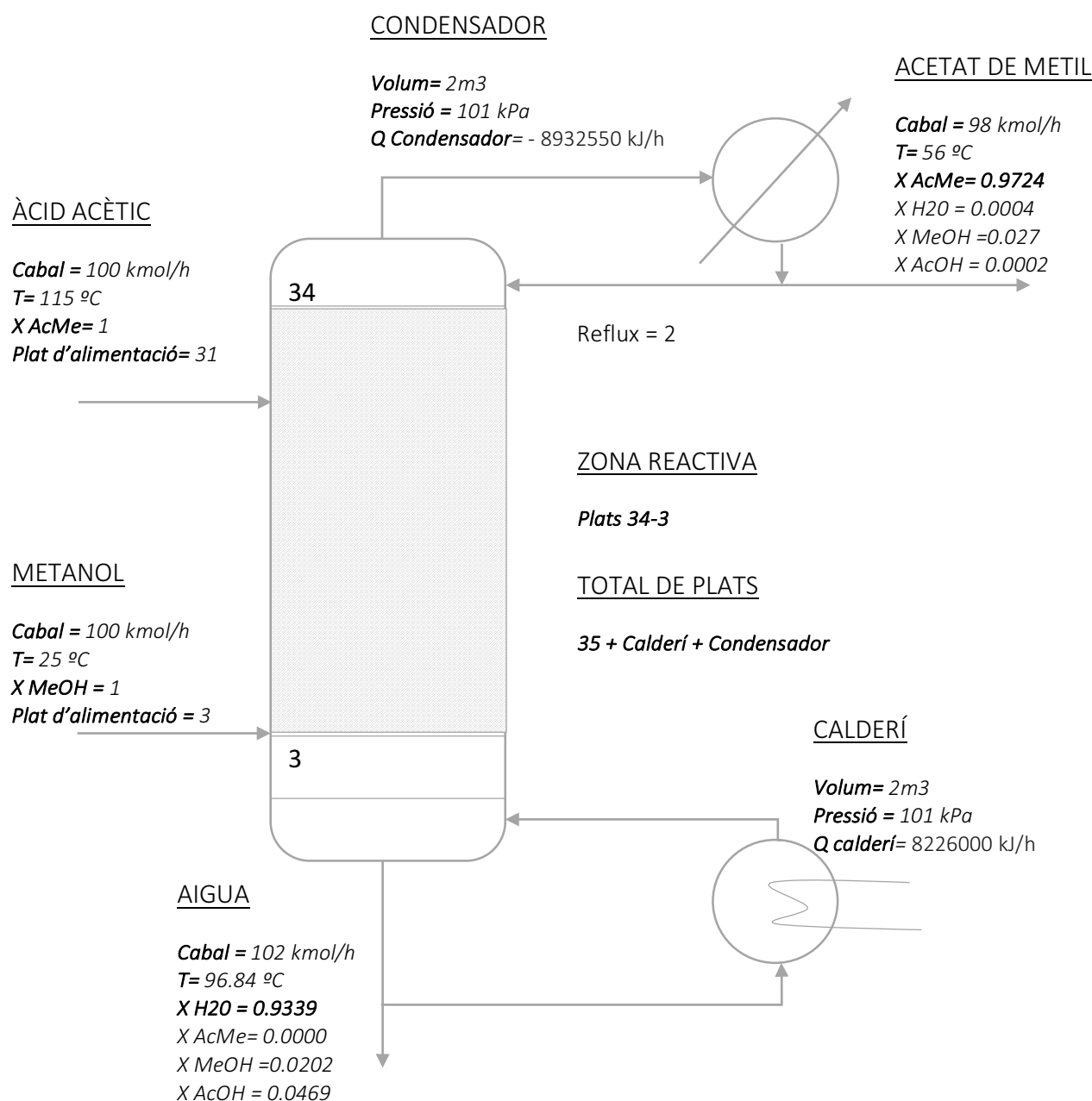


Figura 74: Columna Reactiva industrial definitiva amb resultats
 (Font: Elaboració pròpia)

Taula 32: Característiques finals de la columna industrial

Alçada de la columna	21.1 m
Alçada de la zona d'enriquiment	0.60 m
Alçada de la zona reactiva	18.55 m
Alçada de la zona d'esgotament	1.95 m

9.8 Disseny de la columna reactiva al laboratori

L'objectiu d'aquest treball era poder dur a terme una columna de destil·lació reactiva en el laboratori, per tant el que farem a continuació és passar de la columna que hem estudiat en l'apartat anterior, d'escala industrial a escala laboratori. Per dissenyar aquesta columna es basarà amb l'estudi fet per la columna industrial, per tant escollirem els paràmetres i condicions que s'havien establert com a definitius per la columna a escala gran i s'implementaran per la columna d'escala petita fent un canvi d'escala.

9.8.1 Canvi a escala del laboratori

Per fer el canvi d'escala es parteix d'una àmplia documentació prèvia, per tenir una idea de quina grandària sol tenir una columna reactiva en un laboratori. Els articles consultats amb els seus respectius autors es detallen a la bibliografia.

9.8.2 Característiques de la columna

A la columna que s'ha considerat com a definitiva per escala industrial, li apliquem el canvi d'escala i gràcies al simulador, tal com hem fet per la columna de grans dimensions, es prova, es canvia i es determina quines són les condicions de treball i les característiques amb les que treballarà la columna al laboratori.

Taula 33: Característiques i condicions de treball per la columna en el laboratori

PLATS DE LA COLUMNA	7
PLATS DE ZONA REACTIVA	Del plat 6-1
PLATS D'ALIMENTACIÓ	Àcid Acètic → 6 Metanol → 1
TEMPERATURES D'ALIMENTACIÓ	Àcid Acètic → 115 °C Metanol → 25 °C
CABAL DE ALIMENTACIÓ	Àcid Acètic → 0.2 kmol/h Metanol → 0.2 kmol/h
Pressió	101.3 kPa
DIÀMETRE DEL PLAT	55 mm
ALTURA DEL PLAT	10 mm
TIPUS DE PLAT	Perforat
ESPAI ENTRE PLATS	190 mm
ALÇADA DE LA COLUMNA	1600 mm
ALÇADA DE LA ZONA D'ENRIQUIMENT	200 mm
ALÇADA DE LA ZONA REACTIVA	1010 mm
ALÇADA DE LA ZONA D'ESGOTAMENT	390 mm

La columna es troba representada amb les mesures corresponents en l'apèndix C.

Quan es planteja si aquesta columna es podria dissenyar amb aquestes dimensions i que sigui una columna reactiva de plats, ens trobem que no s'acostuma a dissenyar columnes de plats per laboratoris. En el laboratori es sol implantar columnes de rebliment.

Per tant, s'ha de calcular l'altura equivalent que tindria aquesta columna amb rebliment. En el apartat 3.3 quan es parla de les columnes de rebliment, es fa esment com s'ha de calcular l'altura equivalent d'un plat teòric.

Mitjançant l'altura equivalent d'un plat teòric (HEPT), es pot fer una comparació en una columna de rebliment i una de plats. A partir d'aquesta dada, es pot determinar quina és l'alçada del rebliment mitjançant el nombre de plats teòrics. Aquesta magnitud es pot determinar per la següent equació:

$$HEPT = \frac{Z}{N}$$

on:

Z és l'altura del rebliment

N és el número de plats teòrics

Interessa trobar la Z i per tant ens cal el HEPT. Aquest valor es pot estimar, hi ha taules que relacionen el tipus de rebliment o aplicació amb un valor aproximat de HEPT. Un exemple d'aquestes taules seria la següent:

VALORS H.E.T.P

Tipus de rebliment / aplicació	H.E.T.P (m)
Rebliment de 25mm de diàmetre	0.46
Rebliment de 38 mm de diàmetre	0.66
Rebliment de 50 mm de diàmetre	0.9
Absorció	1.5-1.8
Columnes amb un diàmetre petit (<0.5m)	Diàmetres anteriors + 0.1
Columnes al buit	Diàmetres anteriors + 0.1

Figura 75: Valors de HETP aproximats

(Font: A.Bonsfills, Recull de dades d'operacions de separació)

S'escull el valor que indica per columnes de petit diàmetre. Abans però, cal indicar quin tipus de rebliment es farà servir. El rebliment tindrà el mateix diàmetre de la columna, és un rebliment específic per columnes reactives anomenat *Katapak S* de la casa Sulzer.

S'agafa doncs, el rebliment de 50 mm de diàmetre i es suma el 0.1 que s'especifica per columnes amb diàmetre més petit de 0.6m.

HEPT	1 m
------	-----

$$HEPT = \frac{Z}{N}$$

$$1 = \frac{Z}{7}$$

L'alçada de la columna de rebliment equivalent a la columna de plats és de 7 metres.

9.8.3 Característiques del calderí

En aquest apartat es detalla quines característiques ha de tenir el calderí per complir els requeriments de la columna.

Com a fluid calent que utilitzarem per escalfar serà l'aigua. Considerem com a fluid fred, el que obtenim de la part inferior de la columna, que és majoritàriament aigua.

Taula 34: Característiques a trobar del fluid calent que entra al calderí

FLUID FRED		FLUID CALENT	
Cabal molar	0.626 kmol/h	Cabal molar	
Cabal màssic	19.70 kg /h	Cabal màssic	
T_e	67.45 °C	T_e	
T_s	85.08 °C	T_s	
Cp (l)	3.072 kJ/kg · °C	Cp (l)	4.18 kJ/ kg °C
Cp (g)	-	Cp (g)	1.86 kJ/ kg °C

El que es vol trobar és el que s'ha ombrejat a la taula anterior, es coneix que al calderí se li ha de subministrar una calor de 15610 kJ/h, amb aquesta dada i les fórmules que es detallen a continuació, es pot trobar les dades pel fluid calent que faci possible aquests requeriment d'energia que necessita el calderí.

Sabem que la calor requerida pel calderí compleix:

$$q = m \cdot cp \cdot \Delta T$$

on m correspon al cabal màssic d'un dels fluids, cp és la calor específica pel mateix fluid i l'increment de temperatura és la diferència entre la temperatura de sortida del calderí i la d'entrada al calderí del fluid en qüestió.

Si hi ha canvi de fase per part del fluid s'ha de tenir en compte aquesta equació:

$$q = m \Delta H_v$$

Suposem que volem que el fluid calent que surti a una temperatura de 25 °C i que entri a 110 °C, hi haurà canvi de fase ja que l'aigua entrarà en fase vapor i sortirà en fase líquida, per tant haurem de tenir en compte les dues equacions mencionades anteriorment.

Hem d'arribar a aportar una calor de 15610 kJ/h, ho tenim tot per poder calcular excepte el cabal màssic de l'aigua necessari:

- Calor que aporta l'aigua quan passa de de 110 °C a 100 °C

$$q1 = m \cdot cp \cdot \Delta T$$

$$q1 = m \cdot 1.86 \cdot (110 - 100)$$

- Calor que aporta l'aigua quan canvia e fase:

Sabem que l'entalpia de vaporització és de $\Delta H_v = - 2256.5$ kJ/kg pel cas de la fusió correspon a la mateixa entalpia, canviada de signe.

$$q2 = m \Delta H_v$$

$$q2 = m \cdot 2256.5$$

- Calor que aporta l'aigua quan passa de 100 °C a 25 °C.

$$q_3 = m \cdot c_p \cdot \Delta T$$

$$q_3 = m \cdot 4.18 \cdot (100 - 125)$$

La suma de q_1 , q_2 i q_3 ha de ser la calor total que hem d'aportar al calderí:

$$Q = q_1 + q_2 + q_3$$

$$15610 = q_1 + q_2 + q_3$$

per tant per trobar el cabal màssic de l'aigua:

$$m \cdot 1.86 \cdot (110 - 100) + m \cdot 2256.5 + m \cdot 4.18 \cdot (100 - 125) = 15610$$

Troblem que el cabal màssic d'aigua que hem d'entrar al calderí és 6 kg/h.

Taula 35: Característiques finals dels fluids del calderí

FLUID FRED		FLUID CALENT	
Cabal molar	0.626 kmol/h	Cabal molar	0.332 kmol /h
Cabal màssic	19.70 kg /h	Cabal màssic	6 kg/h
T_e	67.45 °C	T_e	110 °C
T_s	85.08 °C	T_s	25 °C
C_p	3.072 kJ/kg · °C	C_p	4.18 kJ/ kg °C

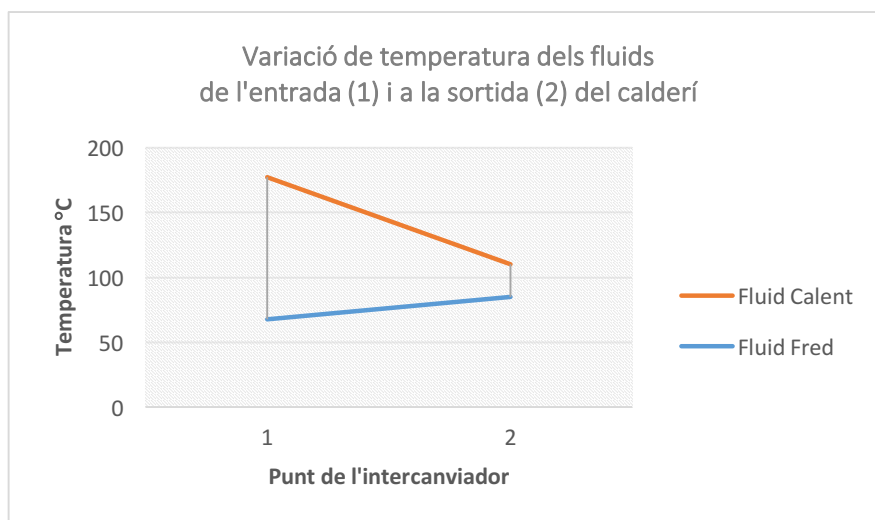


Figura 76: Gràfic de la variació de temperatures en el calderí
(Font: Elaboració pròpia)

Un cop es tenen totes les dades dels fluids, es pot plantejar com serà el nostre equip de carcassa i tubs.

Per qüestions d'aïllament, el fluid calent serà el que passarà per dins dels tubs i el fluid fred per la carcassa, per tant en aquest cas el fluid que passa per dins és l'aigua, que entrarà al calderí a uns 110 °C

Per saber de quants tubs estarà format el calderí i quines dimensions tindrà, partim de la base que coneixem el seu volum i el seu diàmetre, per tant podem conèixer l'àrea i la llargada.

$$V = A \cdot L$$

$$A = \pi \cdot r^2$$

Tenim que el diàmetre del calderí és 0.05 m, per tant el radi és 0.025 m i l'àrea doncs, obtenim que té aquest valor $1.963 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2$.

Amb l'àrea i el volum que és de $0.5 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3$, trobem que la longitud del calderí és de 0.25m.

Per saber quants tubs tindrà aquest intercanviador de calor i quines dimensions tindran aquests tubs sabem que:

$$u = \frac{G}{S} = \frac{G}{\frac{\pi \cdot D^2}{4}}$$

On el cabal volumètric (G), el podem obtenir a partir del cabal màssic del fluid i de la seva densitat. El diàmetre del tub (D) és el que volem trobar i per tant ens fa falta suposar una velocitat, (u).

Suposem que $u = 0.021 \text{ m/s}^*$

**Abans d'escollir aquesta velocitat com a definitiva, he suposat moltes altres però aquesta és la que donava valors més coherents pel que fa les mesures de l'intercanviador de calor amb la resta de l'equip.*

El cabal volumètric:

D'aigua entra al calderí 5.98 kg/h i la seva densitat és de 1000 g/l.

$$6 \frac{\text{kg}}{\text{h}} = \frac{1000 \text{ g}}{1 \text{ kg}} \cdot \frac{1 \text{ l}}{1000 \text{ g}} \cdot \frac{1 \text{ m}^3}{1000 \text{ l}} \cdot \frac{1 \text{ h}}{3600 \text{ s}} = 1.66 \cdot \frac{10^{-6} \text{ m}^3}{\text{s}}$$

per tant el cabal volumètric és de $1.66 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3/\text{s}$.

Per trobar el diàmetre dels tubs substituïm valors a l'equació anterior:

$$u = \frac{G}{S} = \frac{G}{\frac{\pi \cdot D^2}{4}}$$

$$0.021 = \frac{1.66 \cdot 10^{-6}}{\frac{\pi \cdot D^2}{4}} = 0.01 \text{ m}$$

El tub o els tubs que passaran per dins del calderí, tenen un diàmetre de 0.01 m, per tant un radi de 0.005m.

$$A = \pi \cdot r^2$$

Troblem l'àrea dels tubs que correspon $1.43 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2$

Per saber el número de tubs, es tracta de dividir l'àrea del calderí entre l'àrea dels tubs:

$$n^{\circ} \text{ de tubs} = \frac{1.963 \cdot 10^{-3}}{1.43 \cdot 10^{-4}} = 14 \text{ tubs}$$

Podem concloure doncs, que les condicions de treball i les característiques amb les que treballarà el calderí són les que s'especifiquen a la taula 36.

Taula 36: Característiques i condicions de treball pel calderí en el laboratori

TIPUS DE CALDERÍ	Intercanviador de calor de carcassa i tubs
DISPOSICIÓ DELS CORRENTS	En contracorrent
VOLUM DEL CALDERÍ	$0.5 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3 = 0.5 \text{ L}$
DIÀMETRE DEL CALDERÍ	0.05 m
LONGITUD	0.25 m
ÀREA DEL CALDERÍ	$1.963 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2$
DIÀMETRE DELS TUBS	0.01 m
ÀREA DELS TUBS	$1.43 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2$
NÚMERO DE TUBS	14
VELOCITAT DEL FLUID	0.021 m/s
CALOR QUE S'HA D'APORTAR	15610 kJ/h

Les propietats dels dos fluids que entren en el calderí són les que s'especifiquen en la taula 37.

Taula 37: Propietats dels dos fluids que entren en el calderí escala laboratori

*Les densitats i les Calors específiques dels fluids que surten de la columna, en aquest cas, només el fluid fred, els he obtingut del HYSYS.

FLUID FRED		FLUID CALENT	
Cabal molar	0.626 kmol/h	Cabal molar	0.33 kmol/h
Cabal màssic	19.70 kg/h	Cabal màssic	6 kg/h
Cabal volumètric	$2.22 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3/\text{h}$	Cabal volumètric	$6 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3/\text{h}$
T_e	67.45 °C	T_e	110 °C
T_s	85.08 °C	T_s	25 °C
C_p	3.072 kJ/kg · °C	C_p	4.18 kJ/kg · °C
Densitat	887 kg/m ³	Densitat	1000 kg/m ³

El plànol del calderí amb les seves respectives mesures es pot trobar a l'apèndix D.

9.8.4 Característiques del condensador

Semblant a l'apartat anterior, en aquest apartat es detalla quines característiques ha de tenir el condensador per complir els requeriments de la columna.

Com a fluid fred que s'utilitzarà per refredar serà l'aigua. Es considera com a fluid calent, el que s'obté de la part superior de la columna, el destil·lat, que és majoritàriament acetat de metil.

Taula 38: Característiques a trobar pel fluid fred que entra al condensador

FLUID CALENT		FLUID FRED	
Cabal molar	0.54 kmol/h	Cabal molar	
Cabal màssic	37.30 kg/h	Cabal màssic	
T_e	58.38 °C	T_e	
T_s	55.66 °C	T_s	
C_p (l)	1.194 kJ/kg · °C	C_p (l)	4.18 kJ/kg · °C
C_p (g)	-	C_p (g)	1.86 kJ/kg · °C

Es vol trobar el que s'ha ombrejat a la taula anterior, es coneix que al condensador se li ha d'extreure una calor de 16902.9 kJ/h, amb aquesta dada i les fórmules que es detallen a continuació, podem trobar les dades pel fluid fred que faci possible aquest requeriment d'energia.

Sabem que la calor que s'ha d'extreure al condensador compleix:

$$-q = m \cdot cp \cdot \Delta T$$

on m correspon al cabal màssic d'un dels fluids, cp és la calor específica pel mateix fluid i l'increment de temperatura és la diferència entre la temperatura de sortida del calderí i la d'entrada al calderí del fluid en qüestió.

Si hi ha canvi de fase per part del fluid s'ha de tenir en compte aquesta equació:

$$-q = m \Delta H_v$$

Suposem que volem que el fluid fred volem que surti a una temperatura de 110 °C i que entri a 25 °C, hi haurà canvi de fase ja que l'aigua entrarà en fase líquida i sortirà en fase vapor, per tant haurem de tenir en compte les dues equacions mencionades anteriorment.

Hem d'arribar a extreure una calor de 16902.9 kJ/h, ho tenim tot per poder calcular excepte el cabal màssic de l'aigua necessari:

- Calor que aporta al condensador quan passa de 25 °C a 100 °C

$$q1 = m \cdot cp \cdot \Delta T$$

$$q1 = m \cdot 4.18 \cdot (25 - 100)$$

- Calor que aporta l'aigua quan canvia de fase:

Sabem que l'entalpia de vaporització de l'aigua és $\Delta H_v = - 2256.5$ kJ/kg

$$q2 = m \Delta H_v$$

$$q2 = m \cdot (-2256.5)$$

- Calor que aporta l'aigua al escalfar-se de 100 °C a 110 °C

$$q3 = m \cdot cp \cdot \Delta T$$

$$q3 = m \cdot 1.86 \cdot (100 - 110)$$

La suma de $q1$, $q2$ i $q3$ ha de ser la calor total que hem d'extreure del condensador:

$$Q = q1 + q2 + q3$$

$$16902.9 = q1 + q2 + q3$$

per tant per trobar el cabal màssic de l'aigua:

$$m \cdot 4.18 \cdot (25 - 110) + m \cdot (-2256.5) + m \cdot 1.86 \cdot (100 - 110) = - 16902.9$$

Trobem que el cabal màssic d'aigua que hem d'entrar al calderí és de 6.5 kg/h.

Taula 39: Característiques finals dels fluids del condensador

FLUID CALENT		FLUID FRED	
Cabal molar	0.54 kmol/h	Cabal molar	0.36 kmol/h
Cabal màssic	37.30 kg /h	Cabal màssic	6.5 kg/h
T_e	58.38°C	T_e	25 °C
T_s	55.66°C	T_s	110 °C
C_p	1.194 kJ/kg °C	C_p	4.18 kJ/ kg °C

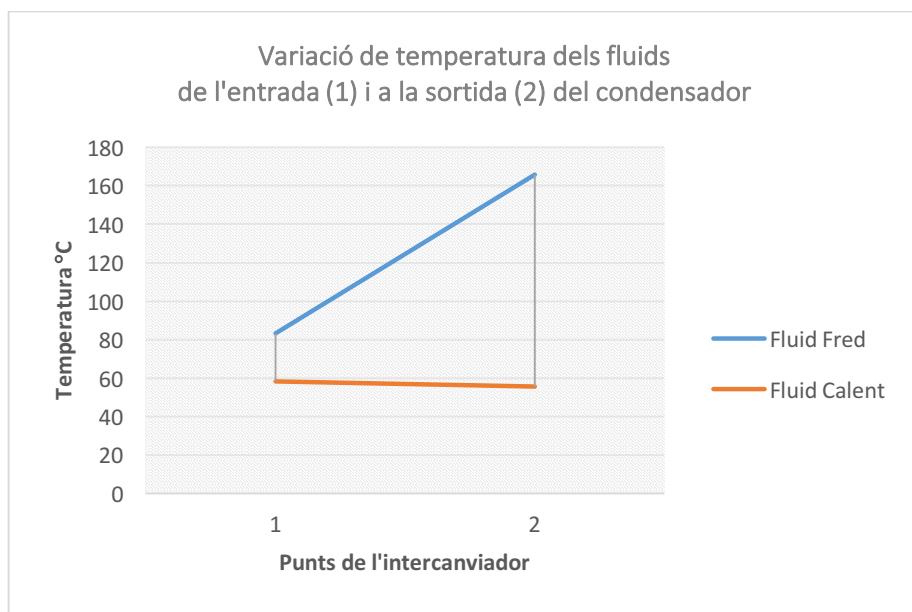


Figura 77: Gràfic de les variacions de temperatura en el condensador
(Font: Elaboració pròpia)

Un cop es coneix totes les dades dels fluids, es pot plantejar com serà el nostre equip de carcassa i tubs.

Per qüestions d'aïllament, el fluid calent serà el que passarà per dins dels tubs i el fluid fred per la carcassa, per tant en aquest cas el fluid que passa per dins és l'acetat de metil, que entrarà al condensador a uns 58.38°C.

Per saber de quants tubs estarà format el condensador i quines dimensions tindrà, com hem fet pel calderí, partim de la base que coneixem el seu volum i el seu diàmetre, per tant podem conèixer l'àrea i la llargada.

$$V = A \cdot L$$

$$A = \pi \cdot r^2$$

Tenim que el diàmetre del condensador és 0.05 m, per tant el radi és 0.025 m i l'àrea doncs, obtenim que té aquest valor $1.963 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2$.

Amb l'àrea i el volum que és de $0.5 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3$, trobem que la longitud del condensador és de 0.25m.

Per saber quants tubs tindrà aquest intercanviador de calor i quines dimensions tindran aquests tubs sabem que:

$$u = \frac{G}{S} = \frac{G}{\frac{\pi \cdot D^2}{4}}$$

On el cabal volumètric (G), el podem obtenir a partir del cabal màssic del fluid i de la seva densitat. El diàmetre del tub (D) és el que volem trobar i per tant ens fa falta suposar una velocitat, (u).

Suposem que $u = 0.14 \text{ m/s}^*$

**Abans d'escollir aquesta velocitat com a definitiva, he suposat moltes altres però aquesta és la que donava valors més coherents pel que fa les mesures de l'intercanviador de calor amb la resta de l'equip.*

El cabal volumètric:

D'acetat de metil entra al condensador 37.30 kg/h i la seva densitat és de 937 g/l .

$$37.30 \frac{\text{kg}}{\text{h}} = \frac{1000 \text{ g}}{1 \text{ kg}} \cdot \frac{1 \text{ l}}{937 \text{ g}} \cdot \frac{1 \text{ m}^3}{1000 \text{ l}} \cdot \frac{1 \text{ h}}{3600 \text{ s}} = 1.105 \cdot \frac{10^{-5} \text{ m}^3}{\text{s}}$$

per tant el cabal volumètric és de $1.105 \cdot 10^{-5} \text{ m}^3/\text{s}$.

Per trobar el diàmetre dels tubs substituïm valors a l'equació anterior:

$$u = \frac{G}{S} = \frac{G}{\frac{\pi \cdot D^2}{4}}$$

$$0.14 = \frac{1.105 \cdot 10^{-5}}{\frac{\pi \cdot D^2}{4}} = 0.01 \text{ m}$$

El tub o els tubs que passaran per dins del condensador, tenen un diàmetre de 0.1 m , per tant un radi de 0.005 m .

$$A = \pi \cdot r^2$$

Troblem l'àrea dels tubs que correspon a $1.43 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2$

Per saber el número de tubs, es tracta de dividir l'àrea del condensador entre l'àrea dels tubs:

$$n^{\circ} \text{ de tubs} = \frac{1.256 \cdot 10^{-3}}{1.43 \cdot 10^{-4}} = 14 \text{ tubs}$$

Es pot concloure doncs, que les condicions de treball i les característiques amb les que treballarà el condensador són les que s'especifiquen en la taula 40.

Taula 40: Característiques i condicions de treball pel condensador en el laboratori

TIPUS DE CONDENSADOR	Intercanviador de calor de carcassa i tubs
DISPOSICIÓ DELS CORRENTS	En contracorrent
VOLUM DEL CONDENSADOR	$0.5 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3 = 0.5 \text{ L}$
DIÀMETRE DEL CONDENSADOR	0.05 m
LONGITUD	0.25 m
ÀREA DEL CONDENSADOR	$1.963 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2$

ÀREA DELS TUBS	0.01 m
DIÀMETRE DELS TUBS	$1.43 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2$
NÚMERO DE TUBS	14
VELOCITAT DEL FLUID	0.14 m/s
CALOR QUE S'HA D'EXTREURE	16902.9 kJ/h

Les propietats dels dos fluids que entren en el condensador són les que s'especifiquen a la taula 41.

Taula 41: Propietats dels dos fluids que entren en el condensador escala laboratori

*Les densitats i les Calors específiques dels fluids que surten de la columna, en aquest cas només el fluid calent, els he obtingut del HYSYS.

FLUID CALENT		FLUID FRED	
Cabal molar	0.54 kmol/h	Cabal molar	0.36 kmol/h
Cabal màssic	37.30 kg/h	Cabal màssic	6.5 kg/h
Cabal volumètric	$3.978 \cdot 10^{-2} \text{ m}^3/\text{h}$	Cabal volumètric	$6.5 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3/\text{h}$
T_e	58.38 °C	T_e	25 °C
T_s	55.66 °C	T_s	110 °C
C_p	1.194 kJ/kg °C	C_p	4.18 kJ/kg °C
Densitat	937 kg/m ³	Densitat	1000 kg/m ³

El plànol del condensador amb les seves respectives mesures es pot trobar a l'apèndix D.

9.8.5 Bombes

Per introduir els reactius dins de la columna amb el cabal desitjat, necessitem l'ús d'una bomba. Des dels dipòsits on es trobaran els reactius fins a la columna necessitem dues bombes, una per a cada reactiu.

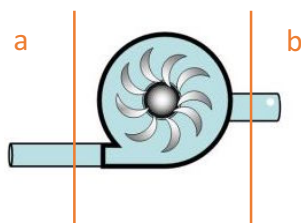
Per determinar les característiques per les quals la bomba ha de treballar per satisfer els requeriments de la columna, s'han de realitzar uns càlculs previs. Farem dos apartats, un per la bomba de l'àcid acètic i un altre per la bomba del metanol.

Abans però, explicarem algunes consideracions i el mètode de càlcul per les bombes.

Per ambdós reactius, la bomba estarà al terra, connectada al dipòsit del reactiu en qüestió. L'alçada variarà per cada reactiu ja que cadascun entra a una alçada diferent de la columna.

El tipus de bomba amb la qual treballarem és la centrífuga.

Per una bomba qualsevol:



On en el punt a es consideren les característiques del fluid abans d'entrar a la bomba i en el punt b les característiques del fluid després de sortir de la bomba.

Per càlcul de les característiques d'una bomba disposem de les següents equacions:

$$\frac{W}{G \cdot \rho \cdot g} = z + \frac{u_a^2}{2g} + \frac{P_a}{\rho g}$$

on:

W = Potència de la Bomba (W)

G = Cabal volumètric (m^3/s)

ρ = densitat del fluid (kg/m^3)

g = gravetat = 9.81 m/s^2

z = altura (m)

P_a = Pressió en el punt a (Pa)

u_a = Velocitat del fluid en el punt a (m/s)

Si el càlcul es vol realitzar, en el punt b de la bomba, només s'ha de canviar la velocitat i la pressió, en comptes del punt a en el punt b, dades pel fluid quan surt de la bomba.

Pel que fa l'alçada de càrrega i de descàrrega amb que la bomba com a màxim pot treballar, es calcula:

$$H_a = \frac{u_a^2}{2g} + \frac{P_a}{\rho g}$$

$$H_b = \frac{u_b^2}{2g} + \frac{P_b}{\rho g}$$

on:

H_a = Correspon a l'alçada de càrrega (m)

H_b = Correspon a l'alçada de descàrrega (m)

Després de calcular aquests paràmetres que he esmentat en les equacions, existeixen unes corbes característiques per les bombes centrífugues, on s'entra al gràfic amb les dades que has obtingut dels càlculs i pots esbrinar quina és la bomba que necessites i amb quines característiques.

9.8.5.1 Bomba per l'àcid acètic

Les dades que es coneixen del corrent de l'àcid acètic per iniciar el càlcul són:

Cabal molar	0.2 kmol/l
Cabal màssic	12 kg/h
Cabal volumètric	$3.178 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3/\text{s}$
Densitat	$1049 \text{ kg}/\text{m}^3$
Pressió	101325 Pa
Temperatura	25 °C

Pel que fa a l'altura de la bomba fins la entrada del reactiu a la columna, sabem que la columna estarà alçada del terra uns 20 cm, amb un suport metàl·lic, que la columna mesura en total 1.6 m i que l'àcid acètic entra en el plat 1, considerant que la numeració dels plats és descendent, per tant es troba a una alçada de 1.42 m.

Z	1.42 m
----------	---------------

**L'àcid acètic passarà per un intercanviador de calor abans d'entrar a la columna. Aquest intercanviador es situarà a l'alçada del plat de l'alimentació. Per això la temperatura d'entrada a la bomba s'especifica que són 25 °C i també l'altura es considera la del plat d'alimentació*

Amb el cabal volumètric, podem trobar amb quina velocitat entrarà el fluid a la bomba, però caldrà suposar un diàmetre de canonada.

Suposem un diàmetre de 0.01m. Així doncs amb l'equació que ja hem utilitzat anteriorment, que relaciona el cabal, la velocitat i la secció podem obtenir la velocitat:

$$u = \frac{G}{S} = \frac{G}{\frac{\pi \cdot D^2}{4}}$$

$$u = \frac{G}{S} = \frac{3.178 \cdot 10^{-6}}{\frac{\pi \cdot 0.01^2}{4}} = 0.04 \text{ m/s}$$

Diàmetre de canonada	0.01 m
Velocitat del fluid	0.04 m/s

Amb les dades anteriors, comencem el càlcul i trobem la potència de la bomba:

$$\frac{W}{G \cdot \rho \cdot g} = z + \frac{u_a^2}{2g} + \frac{P_a}{\rho g}$$

$$\frac{W}{3.178 \cdot 10^{-6} \cdot 1049 \cdot 9.81} = 1.42 + \frac{0.04^2}{2 \cdot 9.81} + \frac{101325}{1049 \cdot 9.81}$$

La potència de la bomba és : **0.368 W**

Ara ja que tenim la potència, podem calcular la pressió a la qual surt en el punt b, ja que la velocitat considerem que és la mateixa.

$$\frac{0.368}{3.178 \cdot 10^{-6} \cdot 1049 \cdot 9.81} = 1.42 + \frac{0.04^2}{2 \cdot 9.81} + \frac{P_b}{1049 \cdot 9.81}$$

Ens dona una pressió de: **101182.5 Pa**

Observem que és pràcticament la mateixa que en el punt a.

Amb aquesta pressió ja podem calcular l'alçada de descarrega de la bomba, ja que amb aquesta dada entrarem a les corbes característiques i així poder concretar quina és la bomba que més s'ajusta al nostre procés.

$$H_b = \frac{0.04^2}{2 \cdot 9.81} + \frac{101182.5}{1049 \cdot 9.81} = 9.84 \text{ m} = 10 \text{ m}$$

Per finalitzar, entrem a les corbes característiques amb el cabal (m^3/h) i amb l'alçada de descàrrega.

Cabal volumètric = $3.178 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3/\text{s} = 11.44 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3/\text{h}$

H = 10 m

En l'apèndix E s'adjunta algunes de les corbes i la corba característica que s'ajusta a les dades d'aquesta bomba i que per tant facilita les característiques de la mateixa.

Les característiques són, segons la norma DIN 24 255, les que ens especifica la taula 42.

Taula 42: Característiques de la bomba per l'àcid acètic

Bomba A420	
Cabal volumètric	$11.44 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3/\text{h}$
H	10 m
rpm	1450
Diàmetre del rodet	175 mm
Rendiment	10%
Potència nominal	0.4 CV
NPSH (Cavitació)	0 m
Diàmetre de canonada	0.01 m
Velocitat del fluid	0.04 m/s

9.8.5.2 Bomba pel metanol

Les dades que tenim del corrent del metanol per iniciar el càlcul són:

Cabal molar	0.2 kmol/l
Cabal màssic	6.4 kg/h
Cabal volumètric	$2.244 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3/\text{s}$
Densitat	792 kg/m^3
Pressió	101325 Pa
Temperatura	25 °C

Pel que fa a l'altura de la bomba fins la entrada del reactiu a la columna, sabem que la columna estarà alçada del terra uns 20 cm, amb un suport metàl·lic, que el metanol entra en el plat 6, considerant que la numeració dels plats és descendent, i que aquest plat es troba a 410 mm de la part més inferior de la columna.

Z	0.43 m
----------	---------------

Amb el cabal volumètric, podem trobar amb quina velocitat entrarà el fluid a la bomba, però caldrà suposar un diàmetre de canonada.

Suposem un diàmetre de 0.01m. Així doncs amb l'equació que ja hem utilitzat anteriorment, que relaciona el cabal, la velocitat i la secció podem obtenir la velocitat:

$$u = \frac{G}{S} = \frac{G}{\frac{\pi \cdot D^2}{4}}$$

$$u = \frac{G}{S} = \frac{2.244 \cdot 10^{-6}}{\frac{\pi \cdot 0.01^2}{4}} = 0.029 \text{ m/s}$$

Diàmetre de canonada	0.01 m
Velocitat del fluid	0.029 m/s

Amb les dades anteriors, comencem el càlcul i trobem la potència de la bomba:

$$\frac{W}{G \cdot \rho \cdot g} = z + \frac{u_a^2}{2g} + \frac{P_a}{\rho g}$$

$$\frac{W}{2.244 \cdot 10^{-6} \cdot 792 \cdot 9.81} = 0.43 + \frac{0.029^2}{2 \cdot 9.81} + \frac{101325}{792 \cdot 9.81}$$

La potència de la bomba és : **0.235 W**

Ara ja que tenim la potència, podem calcular la pressió a la qual surt en el punt b, ja que la velocitat considerem que és la mateixa.

$$\frac{0.235}{2.244 \cdot 10^{-6} \cdot 792 \cdot 9.81} = 0.43 + \frac{0.029^2}{2 \cdot 9.81} + \frac{P_b}{792 \cdot 9.81}$$

Ens dona una pressió de: **101382.5 Pa**

Observem que és pràcticament la mateixa que en el punt a.

Amb aquesta pressió ja podem calcular l'alçada de descarrega de la bomba, ja que amb aquesta dada entrarem a les corbes característiques i així poder concretar quina és la bomba que més s'ajusta al nostre procés.

$$H_b = \frac{0.029^2}{2 \cdot 9.81} + \frac{101382.5}{792 \cdot 9.81} = 13 \text{ m}$$

Per finalitzar, entrem a les corbes característiques amb el cabal (m^3/h) i amb l'alçada de descàrrega.

Cabal volumètric= $2.244 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3/\text{s} = 8.08 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3/\text{h}$

H = 13 m

En l'apèndix E s'adjunta algunes de les corbes i la corba característica que s'ajusta a les dades d'aquesta bomba i que per tant ens facilita les característiques de la mateixa.

Les característiques són, segons la norma DIN 24 255, les que ens especifica la taula 43.

Taula 43: Característiques de la bomba pel metanol

Bomba A420	
Cabal volumètric	$8.08 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3/\text{h}$
H	13 m
rpm	1450
Diàmetre del rodet	200 mm
Rendiment	10%
Potència nominal	0.4 CV
NPSH (Cavitació)	0 m
Diàmetre de canonada	0.01 m
Velocitat del fluid	0.029 m/s

9.8.6 Canonades

En aquest apartat tindrem en compte quantes canonades tenim, quin és el diàmetre que considerem i per tant a quina velocitat passa el fluid corresponent per dins de la canonada.

Totes les canonades de al nostra planta, tindran un diàmetre de 0.01m.

Ens falta saber a quina velocitat passarà cada fluid per cada canonada. En aquest esquema que presento a continuació, es poden veure totes les canonades qui hi ha i calcularem per cadascuna la seva velocitat.

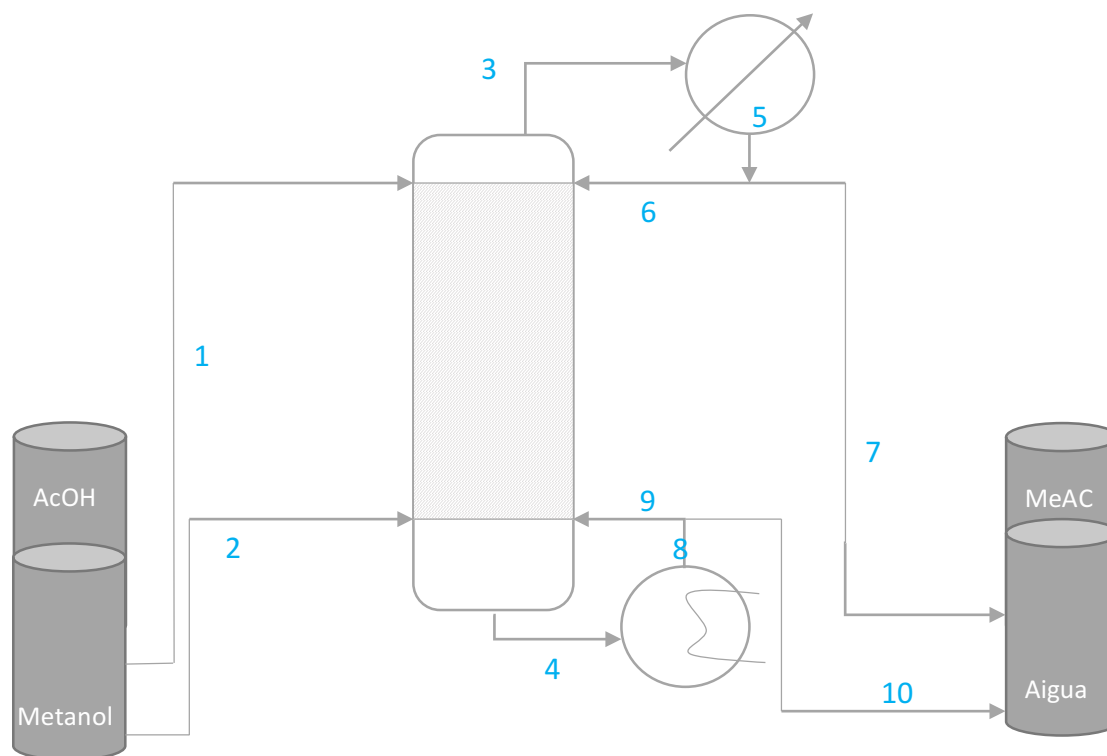


Figura 78: Esquema de la Planta amb canonades numerades
(Font: Elaboració pròpia)

Per calcular la velocitat que té el fluid per una determinada canonada amb un cert diàmetre, utilitzarem la formula que ja hem fet servir en diverses ocasions:

$$u = \frac{G}{S} = \frac{G}{\frac{\pi \cdot D^2}{4}}$$

Per cada canonada, haurem de tenir en compte el cabal que hi passa i tota la resta deixar-ho igual, ja que hem considerat que el diàmetre és igual per totes.

- Canonada 1: Dipòsit Àcid acètic → Columna

Cabal volumètric	$3.178 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3/\text{s}$
Velocitat	0.04 m/s

$$u = \frac{G}{S} = \frac{3.178 \cdot 10^{-6}}{\frac{\pi \cdot 0.01^2}{4}} = 0.04 \text{ m/s}$$

- Canonada 2: Dipòsit Metanol → Columna

Cabal volumètric	$2.244 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3/\text{s}$
Velocitat	0.029 m/s

- Canonada 3: Vapor de dalt de la columna → Condensador

Cabal volumètric	$1.105 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3/\text{s}$
Velocitat	0,14 m/s

- Canonada 4: Líquid de sota de la columna → Calderí

Cabal volumètric	$5.89 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3/\text{s}$
Velocitat	0.075 m/s

- Canonada 5: Sortida condensador → Bifurcació Reflux/ Destil·lat

Cabal volumètric	$1.105 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3/\text{s}$
Velocitat	0.14m/s

- Canonada 6: Reflux → Columna

Cabal volumètric	$7.367 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3/\text{s}$
Velocitat	0,094

- Canonada 7: Acetat de metil → Dipòsit

Cabal volumètric	$3.683 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3/\text{s}$
Velocitat	0.047 m/s

- Canonada 8: Sortida Calderí → Bifurcació "Boilup" / Aigua

Cabal volumètric	$5.894 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3/\text{s}$
Velocitat	0.075 m/s

- Canonada 9: "Boilup" → Columna

Cabal volumètric	$4.19 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3/\text{s}$
Velocitat	0.053 m/s

- Canonada 10: Aigua → Dipòsit

Cabal volumètric	$1.705 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3/\text{s}$
Velocitat	0.022 m/s

9.8.7 Dipòsits

En aquest apartat definim els dipòsits que han de contenir els reactius i els productes. Considerant un funcionament de 10 hores seguides, el volum del dipòsit ha de ser suficient per poder dur a terme l'operació.

Tenim el cabal de cada reactiu i de cada producte per tant podem saber quin volum ha de tenir cada dipòsit en qüestió.

- Dipòsit per l'Àcid acètic

Cabal volumètric	11.44 l/h
Temperatura	115 °C
Funcionament de 10 h	
Volum dipòsit	120 litres

En el cas de l'àcid acètic, veiem que ha d'entrar a la columna a 115 °C i per tant haurem d'escalfar-lo per tal de que pugui entrar a la columna a les condicions requerides. Es podria escollir entre un intercanviador de calor i un dipòsit termosestàtic. En aquest cas, al tractar-se d'un àcid, es decideix per un intercanviador de carcassa i tubs. Més endavant, concretament en l'apartat 9.8.9, es calculen les i es concreten les característiques d'aquest intercanviador.

- Dipòsit pel metanol

Cabal volumètric	8.08 l/h
Temperatura	25 °C
Funcionament de 10 h	
Volum dipòsit	85 litres

- Dipòsit per l'Acetat de Metil

Cabal volumètric	13.26 l/h
Temperatura	55,66 °C
Funcionament de 10 h	
Volum del dipòsit	135 litres

- Dipòsit per l'Aigua

Cabal volumètric	6.139 l/h
Temperatura	85,08 °C
Funcionament de 10 h	
Volum del dipòsit	65 litres

9.8.8 Circuit tancat per l'aigua que utilitzem en el calderí i el condensador

A part dels reactius i els productes que intervenen en la reacció, en el calderí i en el condensador utilitzem l'aigua per fer possible l'intercanvi de calor entre els fluids que surten de la columna.

He optat per fer un circuit tancat per aquest fluid, ja que l'aigua entra al condensador a 25 °C i surt a 110 °C i al calderí ha d'entrar a 110 °C i surt a 25°C.

El circuit que es proposa és:

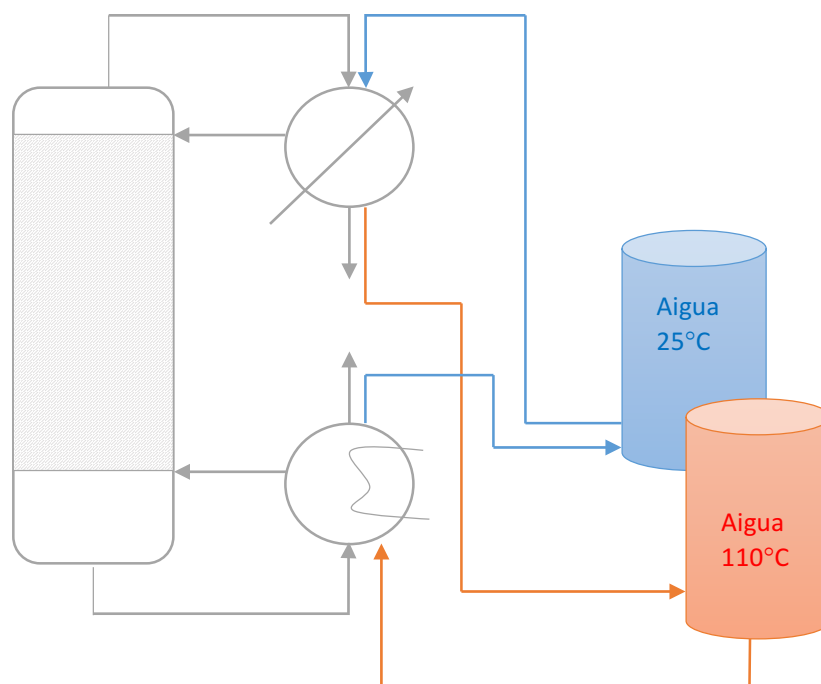


Figura 79: Esquema circuit tancat per l'aigua
(Font: Elaboració pròpia)

Per tant per aquest fluid, també cal especificar les bombes, les canonades i els dipòsits.

9.8.8.1 Bombes

- Bomba per l'aigua cap al condensador

Les dades que tenim del corrent d'aigua que surt del dipòsit i va cap al condensador són:

Cabal molar	0.36 kmol/l
Cabal màssic	6.475 kg/h
Cabal volumètric	$1.798 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3/\text{s}$
Densitat	1000 kg/m^3
Pressió	101325 Pa
Temperatura	25 °C

Pel que fa a l'altura de la bomba fins la entrada de l'aigua al condensador, el condensador es troba a prop del plat 1, considerant que la numeració dels plats és descendent, per tant l'alçada a considerar per la bomba, són els 20 cm del suport de la columna i que el primer plat es troba a uns 200mm per sota dels 1.6 m que mesura en total la columna, per tant l'altura és de 1.42m.

Z	1.42 m
----------	---------------

Amb el cabal volumètric, podem trobar amb quina velocitat entrarà el fluid a la bomba, però caldrà suposar un diàmetre de canonada.

Suposem un diàmetre de 0.01m. Així doncs amb l'equació que ja hem utilitzat anteriorment, que relaciona el cabal, la velocitat i la secció podem obtenir la velocitat:

$$u = \frac{G}{S} = \frac{G}{\frac{\pi \cdot D^2}{4}}$$

$$u = \frac{G}{S} = \frac{1.798 \cdot 10^{-6}}{\frac{\pi \cdot 0.01^2}{4}} = 0.023 \text{ m/s}$$

Diàmetre de canonada	0.01 m
Velocitat del fluid	0.023 m/s

Amb les dades anteriors, comencem el càlcul i trobem la potència de la bomba:

$$\frac{W}{G \cdot \rho \cdot g} = z + \frac{u_a^2}{2g} + \frac{P_a}{\rho g}$$

$$\frac{W}{1.798 \cdot 10^{-6} \cdot 1000 \cdot 9.81} = 1.42 + \frac{0.023^2}{2 \cdot 9.81} + \frac{101325}{1000 \cdot 9.81}$$

La potència de la bomba és : **0.207 W**

Ara ja que tenim la potència, podem calcular la pressió a la qual surt en el punt b, ja que la velocitat considerem que és la mateixa.

$$\frac{0.207}{1.798 \cdot 10^{-6} \cdot 1000 \cdot 9.81} = 1.42 + \frac{0.023^2}{2 \cdot 9.81} + \frac{P_b}{1000 \cdot 9.81}$$

Ens dona una pressió de: **101364.3 Pa**

Observem que és pràcticament la mateixa que en el punt a.

Amb aquesta pressió ja podem calcular l'alçada de descarrega de la bomba, ja que amb aquesta dada entrarem a les corbes característiques i així poder concretar quina és la bomba que més s'ajusta al nostre procés.

$$H_b = \frac{0.023^2}{2 \cdot 9.81} + \frac{101364.3}{1000 \cdot 9.81} = 10.3 \text{ m}$$

Per finalitzar, entrem a les corbes característiques amb el cabal (m^3/h) i amb l'alçada de descàrrega.

$$\text{Cabal volumètric} = 1.798 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3/\text{s} = 6.475 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3/\text{h}$$

$$H = 10.3 \text{ m}$$

En l'apèndix E s'adjunta algunes de les corbes i la corba característica que s'ajusta a les dades d'aquesta bomba i que per tant ens facilita les característiques de la mateixa.

Les característiques són, segons la norma DIN 24 255, les que ens especifica la taula 44.

Taula 44: Característiques de la bomba per l'aigua que entra en el condensador

Bomba A420	
Cabal volumètric	$6.475 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3/\text{h}$
H	10 m
rpm	1450
Diàmetre del rodet	175 mm
Rendiment	10%
Potència nominal	0.4 CV
NPSH (Cavitació)	0 m
Diàmetre de canonada	0.01 m
Velocitat del fluid	0.023 m/s

- Bomba per l'aigua cap al calderí

Les dades que tenim del corrent d'aigua que surt del dipòsit i va cap al calderí són:

Cabal molar	0.33 kmol/l
Cabal màssic	5.98 kg/h
Cabal volumètric	$1.66 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3/\text{s}$
Densitat	$1000 \text{ kg}/\text{m}^3$
Pressió	101325 Pa
Temperatura	25 °C

Pel que fa a l'altura de la bomba fins la entrada de l'aigua al calderí, el calderí es troba a prop del plat 6, considerant que la numeració dels plats és descendent, per tant l'alçada a considerar per la bomba, són els 20 cm del suport de la columna i 410 mm fins al penúltim plat, per tant són 430mm d'alçada.

Z	0.43 m
----------	---------------

Amb el cabal volumètric, podem trobar amb quina velocitat entrarà el fluid a la bomba, però caldrà suposar un diàmetre de canonada.

Suposem un diàmetre de 0.01m. Així doncs amb l'equació que ja hem utilitzat anteriorment, que relaciona el cabal, la velocitat i la secció podem obtenir la velocitat:

$$u = \frac{G}{S} = \frac{G}{\frac{\pi \cdot D^2}{4}}$$

$$u = \frac{G}{S} = \frac{1.661 \cdot 10^{-6}}{\frac{\pi \cdot 0.01^2}{4}} = 0.021 \text{ m/s}$$

Diàmetre de canonada	0.01 m
Velocitat del fluid	0.021 m/s

Amb les dades anteriors, comencem el càlcul i trobem la potència de la bomba:

$$\frac{W}{G \cdot \rho \cdot g} = z + \frac{u_a^2}{2g} + \frac{P_a}{\rho g}$$

$$\frac{W}{1.661 \cdot 10^{-6} \cdot 1000 \cdot 9.81} = 0.43 + \frac{0.021^2}{2 \cdot 9.81} + \frac{101325}{1000 \cdot 9.81}$$

La potència de la bomba és : **0.175 W**

Ara ja que tenim la potència, podem calcular la pressió a la qual surt en el punt b, ja que la velocitat considerem que és la mateixa.

$$\frac{0.175}{1.661 \cdot 10^{-6} \cdot 1000 \cdot 9.81} = 0.43 + \frac{0.021^2}{2 \cdot 9.81} + \frac{P_b}{1000 \cdot 9.81}$$

Ens dona una pressió de: **101203.2 Pa**

Observem que és pràcticament la mateixa que en el punt a.

Amb aquesta pressió ja podem calcular l'alçada de descarrega de la bomba, ja que amb aquesta dada entrarem a les corbes característiques i així poder concretar quina és la bomba que més s'ajusta al nostre procés.

$$H_b = \frac{0.021^2}{2 \cdot 9.81} + \frac{101203.2}{1000 \cdot 9.81} = 10.3 \text{ m}$$

Per finalitzar, entrem a les corbes característiques amb el cabal (m³/h) i amb l'alçada de descàrrega.

Cabal volumètric= $1.661 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3/\text{s} = 5.98 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3/\text{h}$

H = 10.3 m

En l'apèndix E s'adjunta algunes de les corbes i la corba característica que s'ajusta a les dades d'aquesta bomba i que per tant ens facilita les característiques de la mateixa.

Les característiques són, segons la norma DIN 24 255, les que ens especifica la taula 45.

Taula 45: Característiques de la bomba per l'aigua que entra en el calderí

Bomba A420	
Cabal volumètric	$5.98 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3/\text{h}$
H	10 m
rpm	1450
Diàmetre del rodet	175 mm
Rendiment	10%
Potència nominal	0.4 CV
NPSH (Cavitació)	0 m
Diàmetre de canonada	0.01 m
Velocitat del fluid	0.021 m/s

9.8.8.2 Canonades

Si ens fixem en el la figura 78, veiem que necessitem 4 canonades.

Com hem fet en el apartat de les canonades que participen en la columna, suposem que el diàmetre de la canonada és de 1 cm.

Ens falta calcular les velocitats del fluid per cada canonada. Tenim els cabals corresponents i amb la formula que relaciona la velocitat, cabal i secció, trobem la velocitat.

$$u = \frac{G}{S} = \frac{G}{\frac{\pi \cdot D^2}{4}}$$

- Canonada 1: Dipòsit a 25 °C → Condensador

Cabal volumètric	$1.798 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3/\text{s}$
Velocitat	0.023 m/s

$$u = \frac{G}{S} = \frac{1.798 \cdot 10^{-6}}{\frac{\pi \cdot 0.01^2}{4}} = 0.023 \text{ m/s}$$

- Canonada 2: Condensador a 110 °C → Dipòsit a 110 °C

Cabal volumètric	$1.798 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3/\text{s}$
Velocitat	0.023 m/s

$$u = \frac{G}{S} = \frac{1.798 \cdot 10^{-6}}{\frac{\pi \cdot 0.01^2}{4}} = 0.023 \text{ m/s}$$

- Canonada 3: Dipòsit a 110 °C → Calderí

Cabal volumètric	$1.661 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3/\text{s}$
Velocitat	0.021 m/s

$$u = \frac{G}{S} = \frac{1.661 \cdot 10^{-6}}{\frac{\pi \cdot 0.01^2}{4}} = 0.021 \text{ m/s}$$

- Canonada 4: Calderí a 25 °C → Dipòsit a 25°C

Cabal volumètric	1.661 · 10 ⁻⁶ m ³ /s
Velocitat	0.021 m/s

$$u = \frac{G}{S} = \frac{1.661 \cdot 10^{-6}}{\frac{\pi \cdot 0.01^2}{4}} = 0.021 \text{ m/s}$$

9.8.8.3 Dipòsits

Tal com hem fet pels dipòsits dels reactius i els productes, si em considerat un funcionament continu de la columna durant 10 hores, els dipòsits que contenen l'aigua han de ser suficients per satisfer l'operació.

- Dipòsit de 25 °C

Cabal volumètric que arriba	5.98 l/h
Cabal volumètric que surt	6.48 l/h
Temperatura	25 °C
Funcionament de 10 h	
Volum dipòsit	65 litres

- Dipòsit de 110 °C

Cabal volumètric que arriba	6.48 l/h
Cabal volumètric que surt	5.98 l/h
Temperatura	110 °C
Funcionament de 10 h	
Volum dipòsit	65 litres

En aquest dipòsit la temperatura s'ha de mantenir a 110 °C per tant haurem d'escollir escollir un dipòsit termoestàtic per escalfar l'aigua a 110°C a l'inici del procés i després per mantenir-la constant.

9.8.9 Intercanviador de calor per l'àcid acètic

Com ja hem comentat anteriorment, es decideix per escalfar l'àcid acètic amb un intercanviador de calor de carcassa i tubs.

Taula 46: Característiques a trobar del fluid calent que entra a l'intercanviador de calor

FLUID FRED: Àcid Acètic		FLUID CALENT: Aigua	
Cabal molar	0.2 kmol/h	Cabal molar	
Cabal màssic	12 kg /h	Cabal màssic	
T_e	25 °C	T_e	100 °C
T_s	115 °C	T_s	25°C
Cp (l)	2.07 kJ/kg · °C	Cp (l)	4.18 kJ/ kg °C
Cp (g)	-	Cp (g)	1.86 kJ/ kg °C

El que es vol trobar es el cabal que es necessita d'aigua per fer possible la variació de temperatura de l'àcid acètic. Es determina que l'aigua entrarà a 100 °C i sortirà a 25 °C.

La calor que requereix aquest intercanviador es pot saber, ja que tenim totes les dades pel fluid fred. Amb l'equació següent trobarem la calor:

$$q = m \cdot cp \cdot \Delta T$$

on m correspon al cabal màssic d'un dels fluids, cp és la calor específica pel mateix fluid i l'increment de temperatura és la diferència entre la temperatura de sortida del calderí i la d'entrada al calderí del fluid en qüestió.

Si hi ha canvi de fase per part del fluid s'ha de tenir en compte aquesta equació:

$$q = m \Delta H_v$$

En aquest cas, no hi ha canvi de fase per part de l'àcid acètic, ja que la seva temperatura d'ebullició és de 118 °C.

$$q = m \cdot cp \cdot \Delta T$$

$$q = 12 \cdot 2.07 \cdot (115 - 25)$$

Troblem que la calor té un valor de **2235.6 kJ/h**

Tenint la calor que es requereix, podem obtenir el cabal necessari per l'aigua. En aquest cas, per l'aigua tampoc hi ha canvi de fase, ja que arribem a 100 °C.

$$q = m \cdot cp \cdot \Delta T$$

$$2235.6 = m \cdot 4.18 \cdot (100 - 25)$$

El cabal màssic d'aigua que es necessita és de 7.13 kg/h.

Taula 47: Característiques finals dels fluids de l'intercanviador de calor

FLUID FRED		FLUID CALENT	
Cabal molar	0.2 kmol/h	Cabal molar	0.4 kmol /h
Cabal màssic	12 kg /h	Cabal màssic	7.13 kg/h
T_e	25 °C	T_e	100 °C
T_s	115 °C	T_s	25 °C
Cp (l)	2.07 kJ/kg · °C	Cp (l)	4.18 kJ/ kg °C

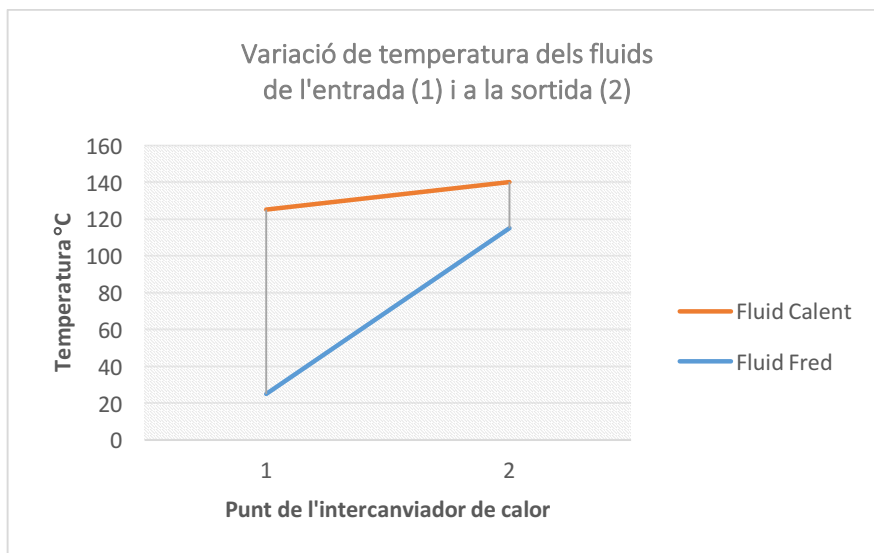


Figura 80: Gràfic de la variació de temperatures en el IC per l'àcid Acètic
(Font: Elaboració pròpia)

Un cop es tenen totes les dades dels fluids, es pot plantejar com serà el nostre equip de carcassa i tubs. Per qüestions d'aïllament, el fluid calent serà el que passarà per dins dels tubs i el fluid fred per la carcassa, per tant en aquest cas el fluid que passa per dins és l'aigua.

Per saber de quants tubs estarà format el intercanviador de calor i quines dimensions tindrà, tenim que:

$$V = A \cdot L$$

$$A = \pi \cdot r^2$$

Es suposa un volum de 0.5 litres i un diàmetre 0.05 m.
Llavors l'àrea del Intercanviador és de $1.936 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2$.

Amb l'àrea i el volum que és de $0.5 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3$, trobem que la longitud del calderí és de 0.25m.

Per saber quants tubs tindrà aquest intercanviador de calor i quines dimensions tindran aquests tubs sabem que:

$$u = \frac{G}{S} = \frac{G}{\frac{\pi \cdot D^2}{4}}$$

On el cabal volumètric (G), el podem obtenir a partir del cabal màssic del fluid i de la seva densitat. El diàmetre del tub (D) és el que volem trobar i per tant ens fa falta suposar una velocitat, (u).

Suposem que $u = 0.025 \text{ m/s}^*$

*Abans d'escollir aquesta velocitat com a definitiva, he suposat moltes altres però aquesta és la que donava valors més coherents pel que fa les mesures de l'intercanviador de calor amb la resta de l'equip.

El cabal volumètric:

D'aigua entren uns 7.13 kg/h i la seva densitat és de 1000 g/l.

$$7.13 \frac{\text{kg}}{\text{h}} = \frac{1000 \text{ g}}{1 \text{ kg}} \cdot \frac{1 \text{ l}}{1000 \text{ g}} \cdot \frac{1 \text{ m}^3}{1000 \text{ l}} \cdot \frac{1 \text{ h}}{3600 \text{ s}} = 1.98 \cdot \frac{10^{-6} \text{ m}^3}{\text{s}}$$

per tant el cabal volumètric és de $1.98 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3/\text{s}$.

Per trobar el diàmetre dels tubs substituïm valors a l'equació anterior:

$$u = \frac{G}{S} = \frac{G}{\frac{\pi \cdot D^2}{4}}$$

$$0.025 = \frac{1.98 \cdot 10^{-6}}{\frac{\pi \cdot D^2}{4}} = 0.01 \text{ m}$$

El tub o els tubs que passaran per dins del calderí, tenen un diàmetre de 0.01 m, per tant un radi de 0.005m.

$$A = \pi \cdot r^2$$

Trobem l'àrea dels tubs que correspon $1.43 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2$

Per saber el número de tubs, es tracta de dividir l'àrea del intercanviador de calor entre l'àrea dels tubs:

$$n^{\circ} \text{ de tubs} = \frac{1.963 \cdot 10^{-3}}{1.43 \cdot 10^{-4}} = 14 \text{ tubs}$$

Podem concloure doncs, que les condicions de treball i les característiques amb les que treballarà el intercanviador són les que ens especifica la taula 48.

Taula 48: Característiques i condicions de treball per l'IC de l'àcid acètic

TIPUS DE CALDERÍ	Intercanviador de calor de carcassa i tubs
DISPOSICIÓ DELS CORRENTS	En contracorrent
VOLUM DEL CALDERÍ	$0.5 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3 = 0.5 \text{ L}$
DIÀMETRE DEL CALDERÍ	0.05 m
LONGITUD	0.25 m
ÀREA DEL CALDERÍ	$1.963 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2$
DIÀMETRE DELS TUBS	0.01 m
ÀREA DELS TUBS	$1.43 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2$
NÚMERO DE TUBS	14
VELOCITAT DEL FLUID	0.025 m/s
CALOR QUE S'HA D'APORTAR	2235.6 kJ/ h

Les propietats dels dos fluids que entren en el intercanviador són les que s'especifiquen a la taula 49.

Taula 49: Propietats dels dos fluids que entren en el calderí escala laboratori

FLUID FRED		FLUID CALENT	
Cabal molar	0.2 kmol/h	Cabal molar	0.4 kmol /h
Cabal màssic	12 kg /h	Cabal màssic	7.13 kg/h
Cabal volumètric	$11.44 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3 / \text{h}$	Cabal volumètric	$7.13 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3 / \text{h}$
T_e	25 °C	T_e	110 °C
T_s	115 °C	T_s	25 °C
C_p	2.07 kJ/kg · °C	C_p	4.18 kJ/ kg °C
Densitat	1049 kg/m ³	Densitat	1000 kg/m ³

El plànol de l'intercanviador de Calor amb les seves respectives mesures es pot trobar a l'apèndix D.

- Dipòsits per l'aigua

Pel fluid calent, hi haurà dos dipòsits, un a 25°C i l'altre a 100°C. El dipòsit que ha de contenir l'aigua a 100°C serà un dipòsit termostàtic.

Aquests dipòsits han de tenir un volum tal que permeti la operació continua durant 10 hores. Per tant els dos dipòsits han de ser d'uns 80 litres.

- Bomba de l'aigua cap al IC

L'aigua que surt del dipòsit termostàtic ha d'entrar a un cabal volumètric de $7.13 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3/\text{h}$ i per tant és necessària una bomba.

El intercanviador de calor es considera que està a l'altura del plat d'alimentació de l'àcid acètic i per tant l'altura a considerar és la mateixa que hem considerat per la bomba de l'àcid acètic.

Z	1.42 m
----------	---------------

Les dades que tenim del corrent de l'aigua per iniciar el càlcul són:

Cabal molar	0.4 kmol/l
Cabal màssic	7.13 kg/h
Cabal volumètric	$1.98 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3/\text{s}$
Densitat	1000 kg/ m^3
Pressió	101325 Pa
Temperatura	100 °C

Amb el cabal volumètric, podem trobar amb quina velocitat entrarà el fluid a la bomba, però caldrà suposar un diàmetre de canonada.

Suposem un diàmetre de 0.01m. Així doncs amb l'equació que ja hem utilitzat anteriorment, que relaciona el cabal, la velocitat i la secció podem obtenir la velocitat:

$$u = \frac{G}{S} = \frac{G}{\frac{\pi \cdot D^2}{4}}$$

$$u = \frac{G}{S} = \frac{1.98 \cdot 10^{-6}}{\frac{\pi \cdot 0.01^2}{4}} = 0.025 \text{ m/s}$$

Diàmetre de canonada	0.01 m
Velocitat del fluid	0.025 m/s

Amb les dades anteriors, comencem el càlcul i trobem la potència de la bomba:

$$\frac{W}{G \cdot \rho \cdot g} = z + \frac{u_a^2}{2g} + \frac{P_a}{\rho g}$$

$$\frac{W}{1.98 \cdot 10^{-6} \cdot 1000 \cdot 9.81} = 1.42 + \frac{0.025^2}{2 \cdot 9.81} + \frac{101325}{1000 \cdot 9.81}$$

La potència de la bomba és : **0.228 W**

Ara ja que tenim la potència, podem calcular la pressió a la qual surt en el punt b, ja que la velocitat considerem que és la mateixa.

$$\frac{0.228}{1.98 \cdot 10^{-6} \cdot 1000 \cdot 9.81} = 1,42 + \frac{0.025^2}{2 \cdot 9.81} + \frac{P_b}{1000 \cdot 9.81}$$

Ens dona una pressió de: **101221 Pa**

Observem que és pràcticament la mateixa que en el punt a.

Amb aquesta pressió ja podem calcular l'alçada de descarrega de la bomba, ja que amb aquesta dada entrarem a les corbes característiques i així poder concretar quina és la bomba que més s'ajusta al nostre procés.

$$H_b = \frac{0.025^2}{2 \cdot 9.81} + \frac{101221}{1000 \cdot 9.81} = 10.3 \text{ m} = 10 \text{ m}$$

Per finalitzar, entrem a les corbes característiques amb el cabal (m^3/h) i amb l'alçada de descàrrega.

Cabal volumètric = $1.98 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3/\text{s} = 7.13 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3/\text{h}$

H = 10 m

En l'apèndix E s'adjunta algunes de les corbes i la corba característica que s'ajusta a les dades d'aquesta bomba i que per tant ens facilita les característiques de la mateixa.

Les característiques són, segons la norma DIN 24 255, les que s'especifiquen en la taula 50.

Taula 50: Característiques de la bomba per l'aigua calefactora

Bomba A420	
Cabal volumètric	$7.13 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3/\text{h}$
H	10 m
rpm	1450
Diàmetre del rodet	175 mm
Rendiment	10%
Potència nominal	0.4 CV
NPSH (Cavitació)	0 m
Diàmetre de canonada	0.01 m
Velocitat del fluid	0.025 m/s

- Canonades

Per últim ens falta saber les característiques de la canonada que portarà l'aigua que s'utilitza com a fluid calefactor per l'àcid acètic.

Com en totes les canonades que participen en la planta, el diàmetre és de 1cm. Només ens falta calcular a quina velocitat passarà el fluid en qüestió per la canonada.

Com que tenim el cabal de l'aigua que requereix l'intercanviador de calor, i tenim el diàmetre de la canonada, podem saber la velocitat del fluid, gràcies a la fórmula que ja s'ha utilitzat amb anterioritat:

$$u = \frac{G}{S} = \frac{G}{\frac{\pi \cdot D^2}{4}}$$

$$u = \frac{G}{S} = \frac{1.98 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3/\text{s}}{\frac{\pi \cdot 0,01^2}{4}} = 0.025 \text{ m/s}$$

Cabal volumètric	$1.98 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3/\text{s}$
Velocitat	0.025 m/s

9.8.10 Control en el procés

9.8.10.1 Reflux

Pel control del reflux utilitzarem un regulador electrònic que acciona una vàlvula de vidre gràcies a un electroimant.

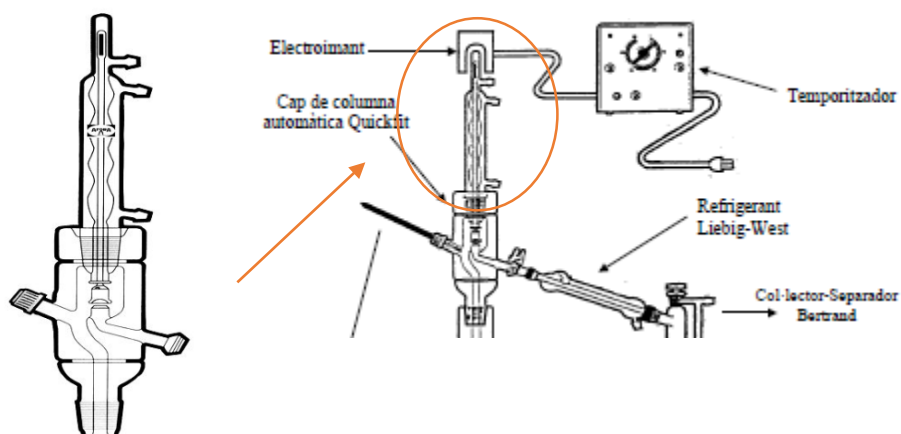


Figura 81: Regulador de reflux

(Font: Dorado, T, Bonsfills, A. Guió de pràctiques d'experimentació en enginyeria química)

En el regulador electrònic s'indica el valor del teu reflux, i accionarà el electroimant en funció d'aquest valor perquè tanqui o obri la vàlvula.

En posició tancada, o sigui en repòs, el vapor condensat és retornat com a reflux. En posició oberta, o sigui alçada, el vapor és separat com a destil·lat.

9.8.10.2 Temperatura

Pel que fa el control de temperatura, s'ha de mesurar la temperatura en diversos punts de tot el procés. Aquest control es pot realitzar amb sondes de temperatura.

Els punts de control de temperatura són els següents:

- Part superior de la columna

Es realitzarà amb una sonda de temperatura incorporat a la part superior de la columna.

- Part inferior de la columna

Es realitzarà de la mateixa manera que a la part superior de la columna, amb una sonda de temperatura.

- Corrent d'àcid acètic que entra a la columna

La sonda de temperatura es trobarà incorporada a l'entrada a la columna del corrent en qüestió.

- Corrent de metanol que entra a la columna

La sonda de temperatura estarà incorporada a l'entrada a la columna del corrent en qüestió.

- Corrent del destil·lat

La sonda de temperatura es trobarà incorporada a la sortida del corrent del destil·lat.

- Corrent del residu

Igual que l'anterior, la sonda es trobarà incorporada a la sortida del residu.

- Dipòsit de l'aigua calefactora per l'àcid acètic

Aquest dipòsit es tracta d'un dipòsit termoestàtic per tant la temperatura vindrà controlada pel mateix dipòsit i mantindrà el fluid a la temperatura que s'especifiqui.

- Dipòsit de l'aigua calefactora que entra al calderí

Aquest dipòsit es tracta d'un dipòsit termoestàtic per tant la temperatura vindrà controlada pel mateix dipòsit i mantindrà el fluid a la temperatura que s'especifiqui.

- Dipòsit de l'aigua refrigerant que entra al condensador

En aquest dipòsit, l'aigua es troba a temperatura ambient, amb una sonda dins del mateix dipòsit per controlar que la temperatura és correcta, és suficient.

- Dipòsit del metanol

En aquest dipòsit, el metanol es troba a temperatura ambient, amb una sonda dins del mateix dipòsit per controlar que la temperatura és correcta, és suficient.

- Dipòsit de l'àcid acètic

En aquest dipòsit, el metanol es troba a temperatura ambient, amb una sonda dins del mateix dipòsit per controlar que la temperatura és correcta, és suficient.

9.8.10.3 Cabal

En quan al control de cabal, es farà amb un cabalímetre. Aquest cabalímetre es situarà a la canonada del fluid en qüestió que ens interressi controlar.

Els punts de control de cabal són:

- Entrada de l'àcid acètic a la columna
- Entrada del metanol a la columna
- Sortida del destil·lat
- Sortida del corrent d'aigua de la columna
- Abans i després de cada bomba instal·lada en el procés
- A les entrades i sortides dels fluids que entren i surten dels intercanviadors de calor: Calderí, Condensador i l'intercanviador de calor per l'àcid acètic.

9.8.10.4 Nivell dels dipòsits

En cada dipòsit hi col·locarem una sonda de nivell. Aquest sensor serà de tipus òptic, ens marcarà el nivell que hi ha al dipòsit.

9.8.10.5 Pressió

En aquest procés, es treballa pràcticament en tota la planta a pressió atmosfèrica. Però es poden instal·lar alguns punts de control per la pressió.

Aquests punts poden ser:

- A la part superior de la columna
- A la part inferior de la columna
- A la sortida del destil·lat
- A la sortida de l'aigua que surt de la columna

Aquest control es pot realitzar amb un controlador de pressió diferencial, el qual et marca si hi ha una diferència de pressió a la que especifica l'usuari, donant també el valor d'aquesta diferència. Aquest controlador es col·loca directament a la canonada del fluid en qüestió.

9.8.11 Esquema de la planta al laboratori

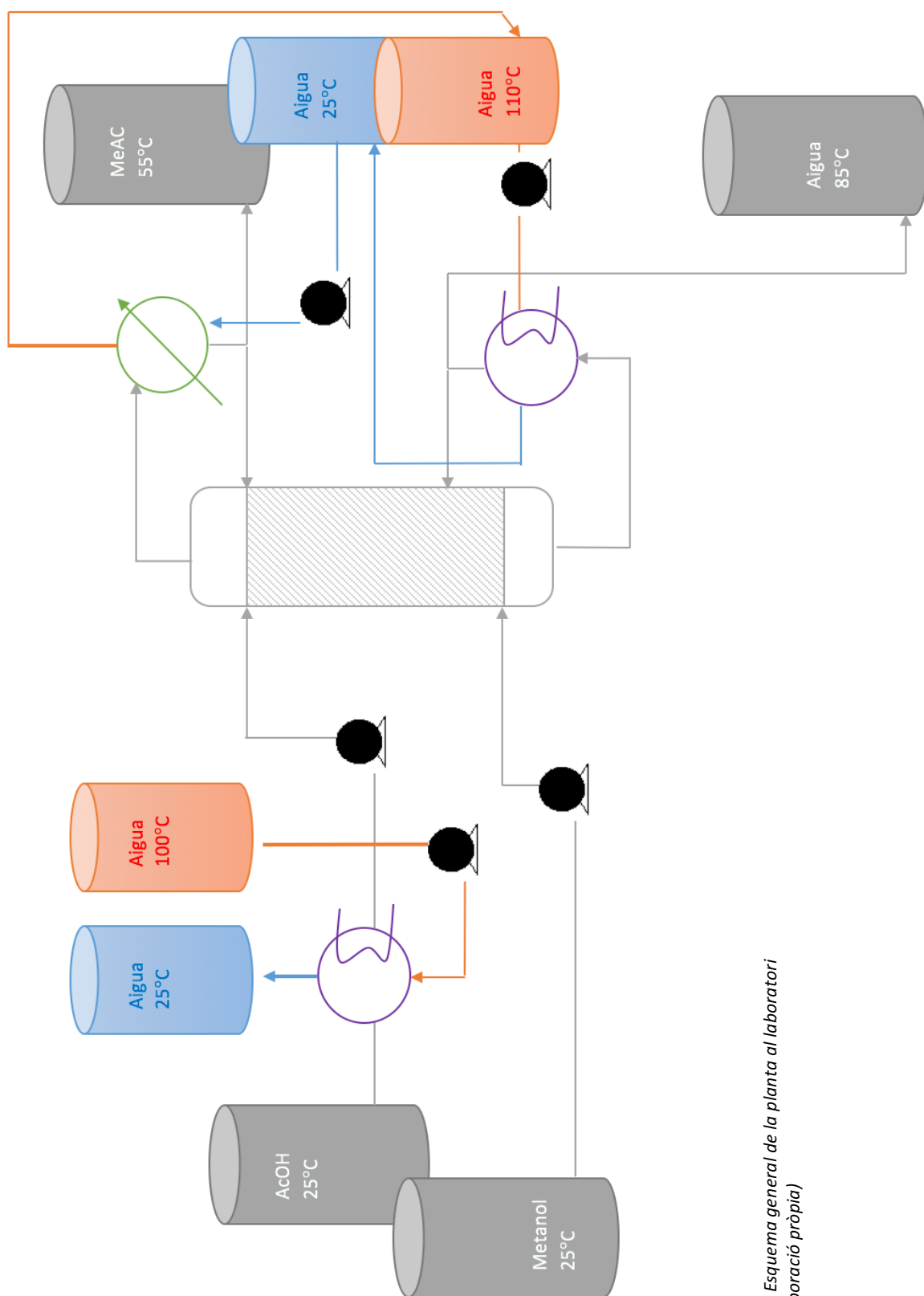


Figura 82: Esquema general de la planta al laboratori
(Font: Elaboració pròpia)

9.9 Resultats finals obtinguts pel HYSYS per la columna en el laboratori

Finalment la columna reactiva a escala laboratori es pot veure d'aquesta manera en el programa de simulació:

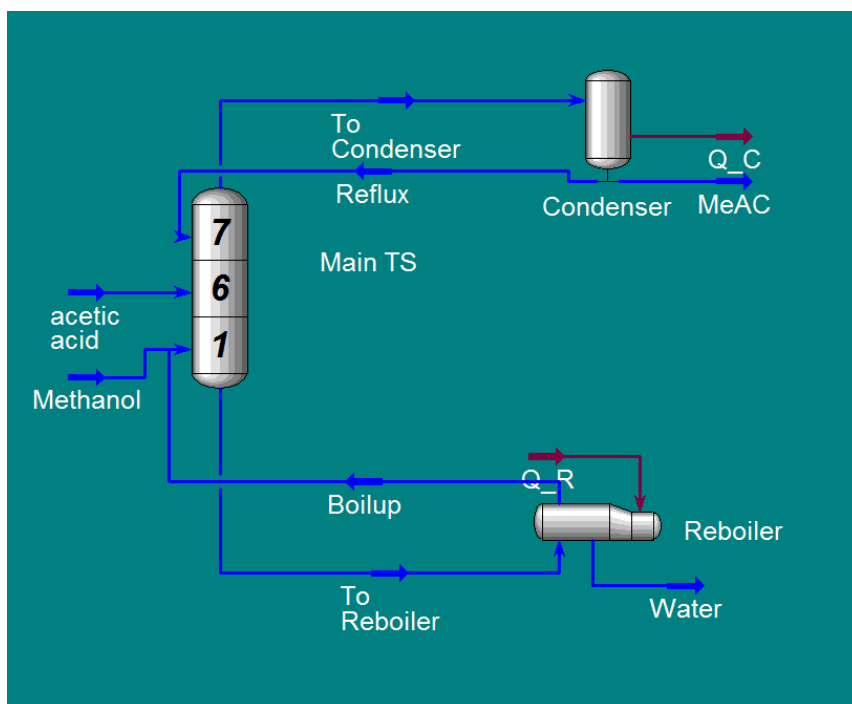


Figura 83: Columna definitiva a escala laboratori
(Font : HYSYS.Plant)

9.9.1 Composicions

	Methanol	H2O	AceticAcid	M-Acetate
Condenser	4.407e-002	5.340e-002	1.128e-002	0.8912
7_Main TS	3.224e-002	5.548e-002	0.1077	0.8046
6_Main TS	2.455e-002	6.228e-002	0.4318	0.4813
5_Main TS	3.425e-002	9.211e-002	0.4253	0.4483
4_Main TS	4.810e-002	0.1351	0.4068	0.4101
3_Main TS	7.423e-002	0.2069	0.3596	0.3593
2_Main TS	0.1372	0.3465	0.2542	0.2621
1_Main TS	0.2716	0.5322	9.855e-002	9.762e-002
Reboiler	0.1300	0.6994	0.1568	1.385e-002

Figura 84: Taula de les composicions plat per plat
(Font : HYSYS.Plant)

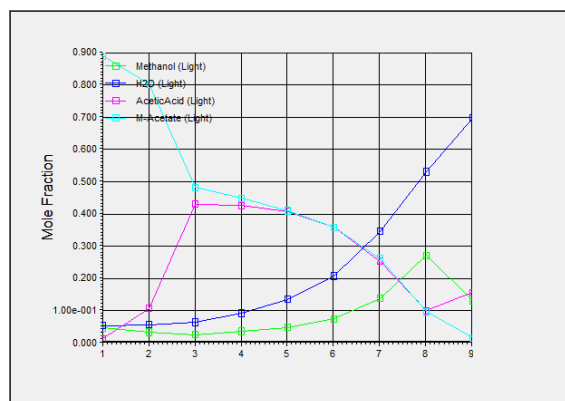


Figura 85: Gràfic de les composicions plat per plat
(Font : HYSYS.Plant)

9.9.2 Temperatures

	Temperature [C]
Condenser	55.66
7_Main TS	58.38
6_Main TS	70.01
5_Main TS	70.06
4_Main TS	69.87
3_Main TS	69.05
2_Main TS	67.47
1_Main TS	67.45
Reboiler	85.08

Figura 86: Taula de les temperatures plat per plat
(Font : HYSYS.Plant)

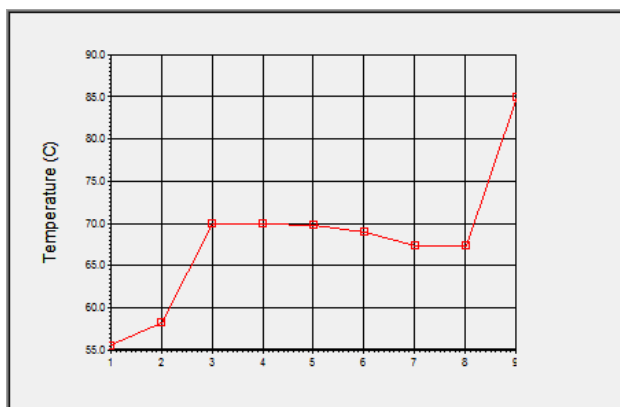


Figura 87: Gràfic de l'evolució de la temperatura en la columna
(Font : HYSYS.Plant)

9.9.3 Pressions

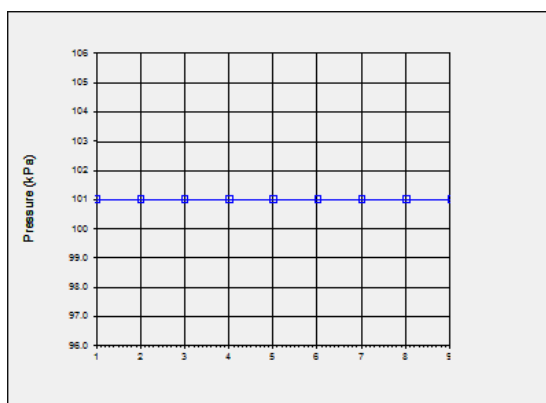


Figura 88: Gràfic de l'evolució de la pressió en la columna
(Font : HYSYS.Plant)

9.9.4 Cabals de líquid i Cabals de vapor

	Temp. [C]	Press [kPa]	Liquid [kgmole/h]	Vapour [kgmole/h]
Condenser	55.66	101.0	0.360000	
7_Main TS	58.38	101.0	0.354106	0.540000
6_Main TS	70.01	101.0	0.535428	0.534106
5_Main TS	70.06	101.0	0.527602	0.515428
4_Main TS	69.87	101.0	0.516467	0.507602
3_Main TS	69.05	101.0	0.497463	0.496467
2_Main TS	67.47	101.0	0.461156	0.477463
1_Main TS	67.45	101.0	0.626596	0.441156
Reboiler	85.08	101.0		0.406596

Figura 89: Taula dels cabals de líquid i vapor juntament amb la temperatura i la pressió de treball
(Font : HYSYS.Plant)

9.9.5 Resultats finals per la columna a escala laboratori

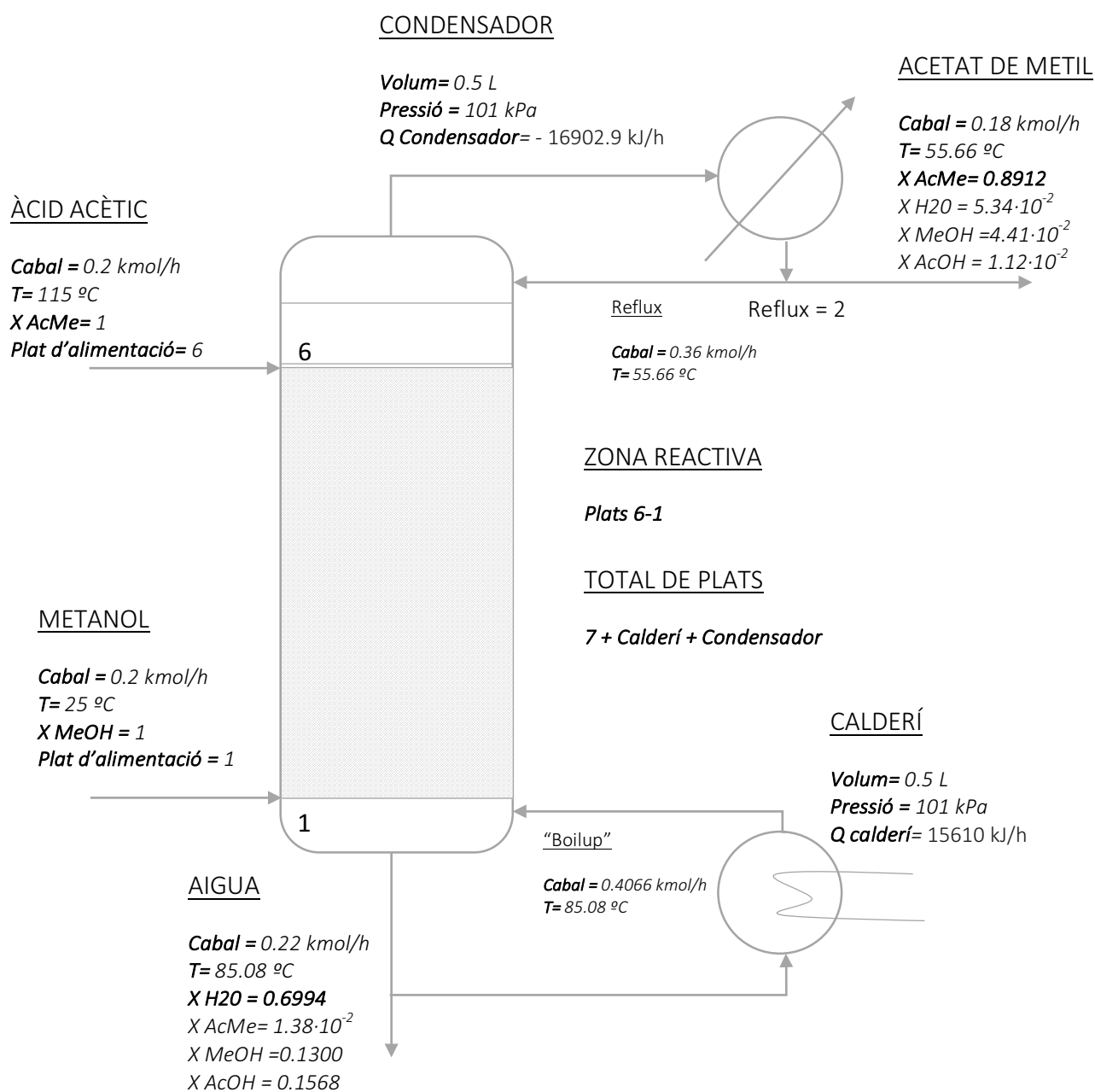


Figura 90: Columna Reactiva a escala laboratori definitiva amb resultats
(Font: Elaboració pròpia)

Taula 51: Dimensions de la columna escala laboratori

Alçada de la columna	1.60 m
Alçada de la zona d'enriquiment	0.20 m
Alçada de la zona reactiva	1.00 m
Alçada de la zona d'esgotament	0.40 m

9.10 Material i cost econòmic estimat d'implantació de la columna

En aquest apartat es mencionarà tot el material i s'estimarà uns costos per cadascun. Finalment s'arribarà a un cost aproximat del que suposaria, econòmicament parlant, implantar la planta al laboratori.

9.10.1 Material i cost columna

Per la columna hi ha moltes opcions a escollir en quan a material. Per definir uns costos i fer una comparativa, s'han escollit el vidre i l'acer inoxidable.

En quan a tipus de columna, en l'apartat de les característiques de columna es fa esment a dos tipus, la de plats i la de rebliment. També es tindran en compte a l'hora de fer els costos.

Evidentment depenent del tipus de material o del tipus de columna fa variar el preu.

Taula 52: Valors estimats per la columna reactiva

TIPUS DE COLUMNA	MATERIAL DE LA COLUMNA	PREU ESTIMAT PER LA COLUMNA	MATERIAL DEL REBLIMENT	ALTURA DEL REBLIMENT	PREU ESTIMAT PEL REBLIMENT	PREU TOTAL
PLATS	Vidre	7500 €	-	-	-	7500 €
PLATS	Acer(AISI 316)	11000 €	-	-	-	11000€
REBLIMENT	Vidre	9500 €	Acer (AISI 316)	5 m	4000 €	9900€
REBLIMENT	Acer(AISI 316)	13000 €	Acer (AISI 316)	5 m	4000 €	17000€

Quan es tracta d'una columna de vidre és més econòmica que quan es tracta de l'acer inoxidable, en aquest cas l'acer AISI 316, ja que el vidre és més econòmic que l'acer.

En quan al tipus de columna, el de rebliment surt més car. Ja que l'altura de la columna de rebliment és bastant més elevat que el de la columna de plats i llavors es necessita més material.

Pel que fa el rebliment, es tracta del *Katapak S* de la casa Sulzer. S'ha escollit el *Katapak S*, perquè per columnes reactives a escala laboratori és el que s'acostuma a fer servir. En la majoria dels articles que les cita a la bibliografia, quan es tracta d'una columna a escala laboratori, són columnes de rebliment i amb aquest tipus de rebliment.

El material del rebliment és l'acer inoxidable AISI 316 ja que amb els reactius, productes i temperatures que treballem, aquest material té bones propietats.

Es poden trobar més detalls pel que fa el rebliment i l'acer inoxidable AISI 316 en l'apèndix F i G, respectivament.

Tot i que sabem que en el laboratori s'acostuma a treballar amb columnes de rebliment, hi ha la possibilitat de treballar amb una columna de plats. En aquest projecte s'ha treballat amb la simulació d'una columna de plats i s'han obtingut uns resultats per una columna de plats, per tant, per fer la planta es recomana escollir de les quatre opcions, la columna de plats amb acer inoxidable.

9.10.2 Cost dels intercanviadors de calor

Per la planta es necessiten 3 intercanviadors de calor: el calderí, el condensador i el intercanviador de calor per l'àcid acètic.

Els tres intercanviadors tenen les mateixes dimensions i característiques.

Per un intercanviador de calor de la casa Gunt Hamburg d'unes dimensions semblants però amb menys tubs es demana per cada intercanviador 750 €.

Taula 53: Valors estimats per l'intercanviador de calor de carcassa i tubs

Número Intercanviadors de calor	Preu aproximat per intercanviador	Preu total
3	750 €	2250 €

Algunes de característiques tècniques de l'intercanviador de calor de la casa Gunt Hamburg es troben en l'apèndix H.

9.10.3 Cost bombes

Per la planta es necessiten 5 bombes:

- La bomba per l'àcid acètic
- La bomba pel metanol
- La bomba per l'aigua refrigeradora del condensador
- La bomba per l'aigua calefactora pel calderí
- La bomba per l'aigua calefactora de l'àcid acètic

Per una bomba centrífuga petita de la casa Lowara, semblant a la que es necessita per la planta, el preu és de 352 €.

El material de la bomba és acer inoxidable del tipus AISI 316 i AISI 304. El cos de la bomba és d'acer AISI 304 i per l'eix i els taps de càrrega i descàrrega amb AISI 316.

Més detalls de l'acer AISI 304 es troben a l'apèndix G, també es troben els de l'acer AISI 316.

Taula 54: Valors estimats de les bombes centrífugues

Número de Bombes Centrífugues	Preu aproximat per una bomba	Preu total
5	352 €	1760 €

Totes les bombes que intervenen en la planta tenen característiques semblants i per tant es considera per les 5, el mateix preu.

Algunes de les característiques tècniques de la bomba escollida es troben en l'apèndix I.

9.10.4 Material i cost Canonades

El material del les canonades serà acer inoxidable (AISI 304 o AISI 316). Per l'acer AISI 316, el preu és més elevat ja que té millors característiques i millor resistència a la corrosió.

En aquesta planta de destil·lació es treballa amb aigua i amb altres fluid que poden contribuir a la corrosió de la canonada i encara més, tenint en compte les temperatures amb les quals es treballa. Per tant, per les canonades que es circuli aigua serà d'acer AISI 304 i per les canonades que hi circulin els altres fluids, que són el metanol, l'àcid acètic i l'acetat de metil, s'escull l'acer AISI 316.

Totes les canonades de la planta tenen un diàmetre d'1 cm i suposem unes longituds estimades.

Taula 55: Valors estimats per les canonades de la planta

CANONADA	METRES DE CANONADA	TIPUS D'ACER	PREU/ m D'ACER	PREU ESTIMAT
Àcid acètic	1.5 m	AISI 316	4.07 €	5.75 €
Metanol	1.5 m	AISI 316	4.07 €	5.75 €
Acetat de Metil	1.5 m	AISI 316	4.07 €	5.75 €
Aigua que surt de la columna	1.5 m	AISI 316	4.07 €	5.75 €
Circuit tancat de l'aigua que entra al condensador i al calderí:				
- Aigua a 25°C que entra al condensador	1.5 m	AISI 304	2.78 €	3.84 €
- Aigua que surt del condensador cap a dipòsit 110 °C	1.5 m	AISI 304	2.78 €	3.84 €
	1.5 m	AISI 304	2.78 €	3.84 €
- Aigua del dipòsit 110 °C cap al calderí	1.5 m	AISI 304	2.78 €	3.84 €
- Aigua que surt del calderí i va cap al dipòsit de 25 °C	1.5 m	AISI 304	2.78 €	3.84 €
Aigua calefactora de l'àcid acètic:				
- Aigua que entra al IC	1.5 m	AISI 304	2.78 €	3.84 €

- Aigua que surt del IC	1.5 m	AISI 304	2.78 €	3.84 €
Reflux	0.5m	AISI 316	4.07 €	2.03 €
"Boil-Up"	0.5 m	AISI 316	4.07 €	2.03 €
TOTAL				50,11 €

**En el càlcul no es contemplen els accessoris per les canonades (colzes, derivacions, connectors...)*

Les diferències entre els dos acers en quan a característiques i resistència a la corrosió, es poden trobar a l'apèndix G.

9.10.5 Material i cost dipòsits

En aquest procés hi participen dos tipus de dipòsits, dipòsits termoestàtics i dipòsits que ni fan cap aportació de calor al fluid. En total tindrem 8 dipòsits, 2 dels quals seran termoestàtics, que corresponen al dipòsit de l'aigua que ha d'entrar al calderí a 110 °C i al dipòsit que conté l'aigua calefactora per l'àcid acètic.

Els dipòsits que no són termoestàtics seran de Polietilè d'alta densitat (PEHD) que aguanten bé les temperatures amb les que es treballa i és resistent tants als reactius com als productes que s'obtenen d'aquest procés.

Pel que fa als dipòsits termoestàtics seran d'acer inoxidable. Hi ha de diversos tipus i diverses marques com per exemple Huber, polyscience...

Taula 56: Costos aproximats pels dipòsits

DIPÒSIT	TIPUS DE DIPÒSIT	LITRES	TEMPERATURA DEL FLUID	PREU
Àcid acètic	No termoestàtic	120	25°C	200 €
Metanol	No termoestàtic	85	25°C	150 €
Acetat de Metil	No termoestàtic	135	50-60°C	220 €
Aigua de la columna	No termoestàtic	65	80-90 °C	110 €
Aigua calefactora del calderí	Termoestàtic	65	110 °C	1500 €
Aigua refrigerant del condensador	No termoestàtic	65	25°C	110 €
Aigua calefactora de l'àcid acètic	Termoestàtic	80	100°C	1800 €
Aigua que surt de l'IC de l'àcid acètic	No termoestàtic	80	25°C	140 €
TOTAL				4230 €

Algunes de les característiques i de les propietats sobre el PEHD es troben en l'apèndix J.

9.10.6 Cost dels reactius

Per fer funcionar durant 10 hores la columna, es necessita una gran quantitat de reactius.

Taula 57: Cost estimat dels reactius

REACTIU	LITRES	PREU / LITRE	PREU
Metanol 99.9%	85	2.5 € / litre	212.5 €
Àcid acètic 99.8 %	120	9 € / litre	1080 €
TOTAL			1292.5 €

9.10.7 Cost total

Després d'especificar tot el material que es requereix tot el procés i especificant per cadascun, un preu aproximat, es pot donar el cost total orientatiu del que costaria implantar aquesta planta de destil·lació reactiva escala laboratori.

Taula 58: Cost total estimat d'instal·lació de la planta

MATERIAL	PREU
Columna de plats d'acer inoxidable	11000 €
Intercanviadors de calor	2550 €
Bombes	1760 €
Canonades	51 €
Dipòsits	4230 €
Reactius	1293 €
TOTAL	20584 €

10. PRÀCTICA DE LABORATORI: PRODUIR ACETAT DE METIL A PARTIR D' ÀCID ACÈTIC I METANOL EN UNA COLUMNA DE DESTIL·LACIÓ REACTIVA

PRÀCTICA D'EXPERIMENTACIÓ EN ENGINYERIA QUÍMICA

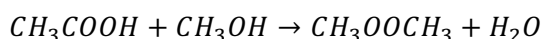
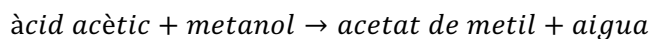
PRODUIR ACETAT DE METIL A PARTIR D'ÀCID ACÈTIC I METANOL EN UNA COLUMNA DE DESTIL·LACIÓ REACTIVA

INTRODUCCIÓ

L'objectiu d'aquesta pràctica és experimentar al laboratori sobre un dels processos més importants dintre del món de l'enginyeria química: la destil·lació reactiva. Un procés que cada cop va agafant més embranzida en la indústria química.

S'utilitzarà una columna de plats que treballarà en continu per obtenir acetat de metil i aigua a partir de la reacció entre l'àcid acètic i el metanol que es produeix dins de la mateixa columna. S'analitzaran les composicions que s'obtenen del destil·lat i del residu mitjançant la cromatografia de gasos pel destil·lat i el mètode de Karl Fischer pel residu. Tot això anirà acompanyat d'un control de la temperatura i cabal.

La reacció que es produeix en la columna reactiva és:



L'acetat de metil al ser més volàtil que l'aigua, sortirà per la part superior de la columna, com a destil·lat i l'aigua, per la part inferior de la columna, com a residu.

REACTIUS

Els reactius necessaris per realitzar aquesta pràctica són:

- Àcid acètic 99.8%
- Metanol 99.9 %

MATERIAL DE LABORATORI

Pel que fa al material es necessitarà el següent:

- Equip de destil·lació
 - o Columna reactiva de plats de 1.6 m d'alçada i 55mm de diàmetre
 - o 3 intercanviadors de carcassa i tubs *Gunt Hamburg*
 - o Regulador de reflux amb electroimant i regulador electrònic
 - o 5 bombes centrífugues *Lowara*
 - o 6 dipòsits
 - Metanol
 - Àcid acètic
 - Aigua cap al condensador
 - Aigua que surt del IC de l'àcid acètic
 - Destil·lat
 - Residu
 - o 2 dipòsits termoestàtics *Polyscience o Huber*

- Aigua cap al calderí
- Aigua cap al IC de l'àcid acètic
- Sondes de temperatura
- Cabalímetres
- Sensors òptics de nivell
- Cromatògraf de gasos *Perkin Elmer Clarus 500*
- Xeringa de gasos d'1 mL
- Xeringa de líquids de 5 mL
- Vial de vidre
- Encapsuladora
- Cronòmetre
- Bany termoestàtic
- Bureta graduada
- Bàscula
- Pipeta aforada
- Vas de precipitats
- Matràs aforat

PROCEDIMENT

1. Posada en marxa de la columna

Abans d'engegar la columna cal assegurar-se de què aquesta estigui correctament muntada i tot estigui perfectament encaixat. Comprovar que tots els dipòsits que hi hagi el nivell suficient pel funcionament òptim de la columna durant 10 hores i que la seva temperatura sigui la que s'indica a la taula següent.

Taula 59: Nivell i temperatura òptimes pels dipòsits de la instal·lació

DIPÒSIT	LITRES	TEMPERATURA DEL FLUID
Àcid acètic	120	25°C
Metanol	85	25°C
Acetat de Metil	135	50-60°C
Aigua de la columna	65	80-90 °C
Aigua calefactora del calderí	65	110 °C
Aigua refrigerant del condensador	65	25°C
Aigua calefactora de l'àcid acètic	80	100°C
Aigua que surt de l'IC de l'àcid acètic	80	25°C

A continuació caldrà muntar el control de la temperatura mitjançant sondes. En la següent taula es mostra on s'ha de col·locar aquesta sonda i quina és la temperatura que hauria de marcar.

Taula 60: Sonde de temperatura

PUNT DE COL·LOCACIÓ DE LA SONDA	TEMPERATURA
Part superior de la columna	58.38 °C
Part inferior de la columna	67.45 °C
Corrent d'àcid acètic que entra a la columna	115 °C
Corrent de metanol que entra a la columna	25 °C
Corrent del destil·lat	55.66 °C
Corrent del residu	85.08 °C

Aquestes han de estar ben posades i encaixades a la columna, de manera que no hi puguin haver pèrdues per possibles esclatxes (es pot utilitzar tefló per aconseguir-ho).

Per la posada en marxa de la columna, s'obren les aixetes dels reactius que comencin entrar en la columna, el calderí es posa en funcionament, obrint l'aixeta de l'aigua que s'utilitza com a calefactor. Els cabals han de ser els màxims que permetin les aixetes. Pel que fa el reflux, en aquests moments es té la columna a reflux total, és a dir amb un cabal de destil·lat nul, per tal d'estabilitzar la columna.

A partir d'ara cal esperar que la mescla s'escalfi fins que comenci a bullir i que s'estabilitzi. Caldrà saber les temperatures d'ebullició dels dos components que formen la mescla, per realitzar un bon control de la temperatura, ja que des del moment que es posa en marxa la columna s'han de prendre mesures de temperatura cada 5 minuts en el calderí i en el cap de la columna, també cal prendre mesures de les composicions a dalt i a baix de la columna.

La columna estarà estabilitzada quan porti una bona estona que la mescla bull en el calderí, a una temperatura semblant a la del component menys volàtil, i quan la temperatura tant del calderí com del cap de columna es mantingui constant amb una diferència mínima de 2 °C i quan les composicions es mantinguin constants a dalt i a baix durant una estona.

Un cop estabilitzada, caldrà posar a punt el reflux. El reflux de la columna està controlat per un aparell anomenat temporitzador que regula el temps en que l'ímant està tancant o obrint la sortida de destil·lat. En el nostre cas, es vol un reflux de 2, caldrà posar el temporitzador en posició automàtic i invers mitjançant els dos botons dels extrems. Llavors s'haurà d'agafar un cronòmetre i anar movent una rodeta on hi ha una escala aproximada de la raó de reflux que s'està seleccionant, fins aconseguir que el reflux sigui 2, és a dir que l'ímant estigui dos segons tancant la sortida de destil·lat i un segon deixant-ne sortir. A continuació es mostra un esquema d'aquest temporitzador:

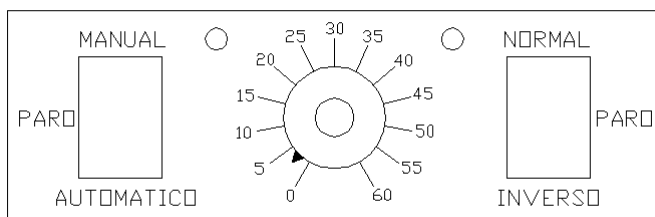


Figura 91: Temporitzador que regula la raó de reflux

(Font: T.Dorado, A. Bonsfills. *Guí de pràctiques d'Experimentació en Enginyeria Química*)

2. Funcionament

Després d'estabilitzar la columna i establir la raó de reflux, ja es pot començar la destil·lació pròpiament dita.

A partir d'aquí es tracta de fer les següents operacions:

- Cada 10 minuts treure una mostra del destil·lat per esbrinar la composició d'aquest mitjançant la cromatografia de gasos.
- Cada 15 o 20 minuts treure una mostra del residu per esbrinar la composició d'aquest mitjançant el mètode de Karl Fischer.
- Cada 10 minuts anotar la temperatura de la part superior i inferior de la columna.
- Cada 10 minuts mirar el cabalímetre del destil·lat i el del residu i anotar el cabal que hi passa.

Al llarg de la pràctica s'ha d'anar controlant el nivell dels dipòsits, les temperatures amb què es troben mateixos, els cabalímetres del procés, la temperatura d'entrada per l'àcid acètic i la pressió amb la qual treballa la columna.

3. Cromatografia de gasos per la composició del destil·lat

Per saber quina és la composició que hi ha en el destil·lat es farà gràcies a la cromatografia de gasos. Si la columna ha treballat correctament, el que ens trobarem en el destil·lat és acetat de metil com a component majoritari i en menys quantitat, reactius que no han reaccionat i aigua.

Per fer aquest procés es necessitarà el cromatògraf de gasos amb aquestes característiques:

CROMATÒGRAF	PERKIN ELMER CLARUS 500
Detector	Ionització de flama
Integrador	Hewlett Packard 3390A
Columna del cromatògraf	CP wax 52 CB Diàmetre = 0.25 mm Longitud = 25 m
Gas portador	Heli



Figura 92: Cromatògraf Perkin Elmer Clarus 500
(Font: Fotografia obtinguda del laboratori de l'UPC de Manresa)

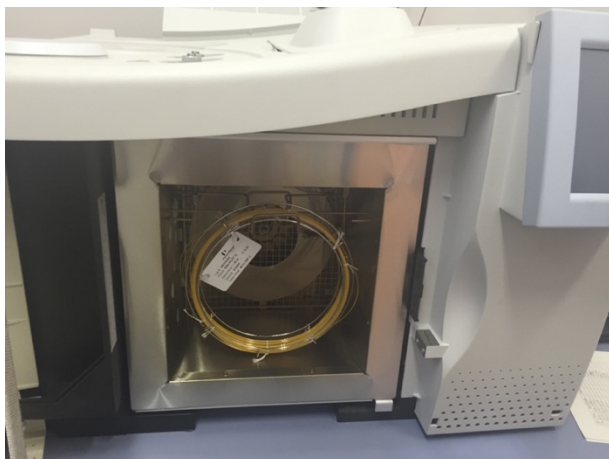


Figura 93: Imatge de la columna CPwax
(Font: Fotografia obtinguda del laboratori de l'UPC de Manresa)

Procediment per determinar la composició del destil·lat:

- Agafem una mostra de destil·lat de 5 mL amb la xeringa de líquids
- Aquest volum de destil·lat s'introdueix dins del vial i s'encapsula hermèticament.
- El vial es posa dins d'un bany termostàtic a 60 °C durant 5 minuts, perquè s'estableixi l'equilibri líquid-vapor de la mescla. Un cop han passat aquest 5 minuts, amb una xeringa de gasos es penetra el tap hermètic i s'agafa 1µL del "head space" que correspon al vapor que s'ha format en el vial. Aquest vapor no conté aigua, ja que l'aigua no s'evaporarà a la temperatura de bany termoestàtic. D'això es tracta el fet de posar-ho en un vial i només agafar el vapor format en el "head space", ja que en el cromatògraf no es pot fer analitzar una mescla amb aigua, ja que aquesta fa malbé la columna del mateix.
- Aquest µL és el que s'injecta al cromatògraf
- Abans però s'ha d'assegurar que estan obertes les aixetes d'heli, de hidrogen i d'aire. Aquests han de tenir un cabal de 1ml/min, de 45ml/min i de 450 ml/ min respectivament.
- La temperatura del cromatògraf a l'inici a d'estar a 50 °C i la temperatura de l'injector a de ser 250 °C.
- Un cop s'injecta el vapor al cromatògraf s'han de seguir aquesta passos:
 - Es manté la temperatura a 50 °C durant 1 minut
 - S'incrementa 10 °C cada minut fins arribar a 150 °C
 - Un cop s'arriba als 150°C es manté 2 minuts.
- Es finalitza l'anàlisi i per l'ordinador ens dóna les composicions de la mescla injectada

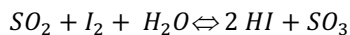


Figura 94: Imatge del vial encapsulat amb la xeringa de gasos
(Font: Fotografia obtinguda del laboratori de l'UPC de Manresa)

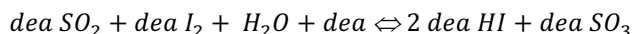
4. Mètode de Karl Fischer per la composició del residu

Aquest mètode només és per determinar quina quantitat d'aigua hi ha en una mescla, no ens donarà les composicions exactes de cada compost com en el cas de la cromatografia de gasos.

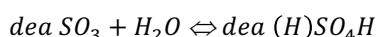
El mètode Karl Fischer es basa en la reacció estequiomètrica entre el SO_2 i el I_2 en presència d'aigua:



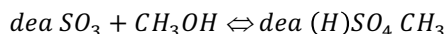
Per fixar els reactius i els productes de la reacció, es treballa en presència de dietanolamina. Els compostos estan en la reacció com complexos de dietanolamina ($NH(CH_2CH_2OH)_2$, dea):



El complex $dea SO_3$ format podria consumir un excés addicional d'aigua d'acord amb la següent reacció:



Per evitar-ho es treballa en presència d'un gran excés de metanol:



En definitiva, el procediment de Karl Fischer implica un consum 'un mol de iode i un de diòxid de sofre per cada mol d'aigua present en el medi de reacció.

En la pràctica es treballa amb un excés de dietanolamina, de metanol i de diòxid de sofre, per tant la quantitat de iode és la que permet determinar la quantitat d'aigua que hi ha a la mostra.

Procediment per determinar del residu l'aigua per mètode Karl Fischer:

- Agafem una mostra de residu amb la xeringa de líquids de 5 ml
- Preparem una mescla que contingui metanol, dietanolamina, diòxid de sofre i iode, on el volum del iode sigui conegut i la resta amb excés, sobretot el metanol.
- Es procedeix a fer una valoració volumètrica, en un vas de precipitats hi posem la nostra mostra i en la bureta graduada la mescla per fer la valoració.
- Obrim la bureta graduada i anem agitant la mescla. La valoració es dona per finalitzada quan la mostra adquireix un color vermellós, ja que el reactiu valorant és d'aquest color.
- Anotem el volum consumit en la valoració

Com que sabem la quantitat de iode que hi havia en la mescla i el volum que s'ha consumit, podem saber quan iode hi havia en aquest volum i per tant quina és la quantitat d'aigua en la nostra mescla.

5. Desconnexió de l'aparell

Un cop han passat les 10 hores de funcionament o la pràctica es dona per finalitzada, es procedeix a la parada de la columna.

Es tancaran les aixetes dels reactius i es controlarà els cabals del destil·lat i el residu, quan es facin mínims, es tanquen les aixetes dels dipòsits pels productes i les altres aixetes dels fluids refrigeradors i escalfadors dels processos. També s'han de desconnectar els intercanviadors de calor.

QÜESTIONS I RESULTATS

- 1) Quina és la composició en el destil·lat?
- 2) Quina és la composició d'aigua en el residu? Procés de càlcul per mètode Karl Fischer.
- 3) Creus que és un bon resultat el que s'obté de Metil acetat? Què faries per millorar la composició de Metil Acetat en el destil·lat?
- 4) Gràfic de l'evolució de les temperatures de la part superior de la columna en funció del temps
- 5) Gràfic de l'evolució de les temperatures de la part inferior de la columna en funció del temps
- 6) Gràfic de l'evolució del cabal de destil·lat en funció del temps
- 7) Gràfic de l'evolució del cabal de residu en funció del temps.

11. CONCLUSIONS

Finalment, es pot concloure que s'ha arribat a l'objectiu inicialment proposat d'aquest projecte, dissenyar una pràctica docent d'Experimentació en Enginyeria Química sobre la destil·lació reactiva.

- En l'estudi de la columna a escala industrial s'ha pogut observar que els resultats que s'obtenien de la simulació eren molt interessants i per tant es podia plantejar portar-la a terme a escala laboratori.
- En l'escala laboratori s'ha vist que els resultats no són tant bons com a escala industrial, cosa que és d'esperar. És una columna que treballa amb pocs plats i amb unes mesures molt més petites que la columna industrial. El temps de residència dels reactius no és el mateix per una columna amb major nombre de plats, per aquesta és molt major, per tant, en la reacció i en la posterior separació, no es poden obtenir els mateixos resultats quan passes d'una escala industrial a una escala de laboratori, per molt que el canvi d'escala sigui exacte.
- Amb els resultats de la columna reactiva al laboratori, el disseny i els costos d'implementació d'aquesta, es pot dir que és possible realitzar-se i per tant s'ha redactat una pràctica docent pels futurs estudiants d'enginyeria química.

És molt interessant de cara als estudiants, que puguin estudiar i sobretot, experimentar aquest tipus de columna. La implantació en les indústries no ha parat de créixer en els últims anys i encara hi ha moltes mescules a estudiar per poder-les realitzar amb aquesta tècnica. La destil·lació reactiva té molts avantatges, però segons quines mescules es fan resistents a ser processades per aquesta operació.

Que els estudiants rebin una base d'aquest tipus de destil·lació, ho trobo molt interessant, i no només una base teòrica, que evidentment és necessària i fonamental, també una base pràctica, que al cap i a la fi és amb el que es troben quan acaben la carrera.

12. BIBLIOGRAFIA

LLIBRES

- Bitlloch, I. (2014) *Taules de Química-Física* . EPSEM-UPC.
- Bonsfills, A. (2015) *Recull de dades d'Operacions i Separació* . EPSEM-UPC.
- Bonsfills, A. (2015) *Recull de dades d'enginyeria de transport de fluids i transmissió de la calor*. EPSEM-UPC.
- Brenner,S., Gierer,C., Strashok,C., Hugo,L., Sachedina,M., Chau,A., Jamil,A., Nguyen,N., Sternon,Y., Hanson,K.,Lowe,C. (2001) *HYSYS.Plant, Simulation Basis (Version 2.2)* .Canada: Hyprotech Ltd.
- Brenner,S., Gierer,C., Strashok,C., Hugo,L., Sachedina,M., Chau,A., Jamil,A., Nguyen,N., Sternon,Y., Hanson,K.,Lowe,C. (2000) *HYSYS.Plant, Steady State Modelling (Version 2.2)* .Canada: Hyprotech Ltd.
- Brenner,S., Gierer,C., Strashok,C., Hugo,L., Sachedina,M., Chau,A., Jamil,A., Nguyen,N., Sternon,Y., Hanson,K.,Lowe,C. (2001) *HYSYS.Plant, User Guide (Version 2.2)* .Canada: Hyprotech Ltd.
- Dorado, T. i Bonsfills, A. (2014). *Guions de pràctiques d'Experimentació en Enginyeria Química*. EPSEM- UPC:
- Estrada-Villagrana, A.D. (2002). *On the Modeling of Dynamics and Operation of Reactive Distillation*. Tesis Doctoral. University College London Torrington Place.
- Fogler, H. (1999). *Elements of chemical reaction engineering*. Upper Saddle River, N.J.: Prentice Hall PTR.
- Grau, M.D. (2015) *Recull de dades de Bases de l'Enginyeria Química*. EPSEM-UPC.
- Lao- Luque, C. (1995). Efecto de los enzimas pectolíticos en la calidad de vinos y cavas. Tesis doctoral. Universitat de Barcelona.
- Lujan Blanco, I. (2004). *La destil·lació amb reacció química*. Treball fi de carrera d'enginyeria tècnica industrial especialitat química. EUPM-UPC.
- McCabe, W., Smith, J., Harriott, P., Lanto Arriola, M., Collí Serrano, M. and Osorio Mirón, A. (2002). *Operaciones unitarias en ingeniería química*. México: McGraw-Hill.
- Migueles, M. (1998). *Proyecto de una columna de rectificación con reacción química*. Treball fi de carrera d'enginyeria tècnica industrial especialitat química. EUPM-UPC.
- Santamaría, J. (1999). *Ingeniería de los reactores*. Madrid: Síntesis.
- Sundmacher, K. and Kienle, A. (2003). *Reactive distillation*. Weinheim: Wiley-VCH.

ARTICLES

- Almeida-Rivera, C.P., Swinkels, P.L.J., Grievink, J. (2004). *Designing reactive distillation processes: present and future*. Computers and Chemical Engineering. 28 1997-2020.
- Cruz-Díaz, M., Buchaly, C., Kreis, P., Pérez-Cisneros, E.S., Lobo-Oehmichen, R., Górak, A. (2012). *Synthesis of n-propyl propionate in a pilot plant reactive distillation column: Experimental study and simulation*. Computers and Chemical Engineering. 39 118-128.
- Hoffmann, A., Noeres, C., Górak, A. (2004). *Scale-up of reactive distillation columns with catalytic packings*. Chemical Engineering and Processing. 43 383-395
- Jan Harmsen, G. (2007). *Reactive Distillation: The front runner of industrial process intensification. A full review of commercial applications, research, scale-up, design and operation*. Chemical Engineering and Processing. 46 774 – 780.
- Klöcker, M., Kenig, E.Y., Górak, A., Markusse, A.P., Kwant, G., Moritz, P. (2004). *Investigation of different column configurations for the ethyl acetate synthesis via reactive distillation*. Chemical Engineering and Processing. 43 791-801.
- Kolodziej, A., Jaroszynski, M., Salaki, W., Fraczek, K., Górak, A. (2004). *Catalytic distillation for tame synthesis with structured catalytic packings*. Chemical Engineering Research and Design. 82 175-184.
- Macarron, A. (1959). *Systèmes méthanol—acide acétique; éthanol—acide acétique; n-propanol—acide acétique; n-butanol—acide acétique*. Chem.Eng.Sci. 10 150-152.
- Mekala, M., Reddy Goli, V. (2015) *Kinetics of esterification of methanol and acetic acid with mineral homogeneous acid catalyst*. Chinese Journal of Chemical Engineering. 23 100-105.
- Rönnback, R., Salmi, T., Vuori, A., Haario, H., Lehtonen, J., Sundqvist, A., Tirronen, E. (1997) *Development of a kinetic model for the esterification of acetic acid with methanol in the presence of a homogeneous acid catalyst*. Chemical Engineering Science. 52 3369-3381.
- Santaella, M.A., Orjuela, A., Narváez, P.C. (2015). *Comparison of different reactive distillation schemes for ethyl acetate production using sustainability indicators*. Chemical Engineering and Processing. 96 1-13.
- Schmitt, M., Hasse, H., Althaus, K., Schoenmakers, H., Götze, L., Moritz, P. (2004). *Synthesis of n-hexyl acetate by reactive distillation*. Chemical Engineering Processing. 43 397-409.
- Singh, D., Kumar Gupta, R., Kumar, V. (2014). *Simulation of a plant scale reactive distillation column for esterification of acetic acid*. Computers and Chemical Engineering. 73 70-81
- Steinigeweg, S., Gmehling, J. (2002). *N-Butyl acetate synthesis via reactive distillation: thermodynamic aspects, reaction kinetics, pilot-plant experiments and simulation*. Industrial Engineering Chemistry. 41 5483-5490.
- Pratap Singh, B., Singh, R., Pavan Kumar, M.V., Kaistha, N. (2005). *Steady-State analyses for reactive distillation control: An MTBE case study*. Journal of Loss Prevention in the Process Industries. 18 283-292.

- Tamir A. (1980). *Excess Gibbs Free Energy in Methanol + Acetic Acid and Ethanol + Acetic Acid*. J.Chem.Thermodyn. 12 181-186.
- Tang, Y.T., Chen, Y.W., Huang, H.P., Yu, C.C. (2005). *Design of a reactive distillations for acetic acid esterification*. AIChE Journal. 51 1683-1700
- Taylor, R., Krishna, R. (2000). *Modelling reactive distillation*. Chemical Engineering Science. 55 5183-5229.
- Tuchlenski, A., Beckmann, A., Reusch, D., Düssel, R., Weidlich, R., Janowsky, R.(2001). *Reactive Distillation – Industrial applications, process design and scale –up*. Chemical Engineering Science. 56 387-394.
- Völker, M., Sonntag, C., Engell, S. (2007). *Control of integrated processes: A case study on reative distillation in a medium-scale pilot plant*. Control Engineering Practice. 15 863-881.
- Zhang, L., Chen,H., Yuan,Y., Yu, J., Wang,S., Huang,K. (2015). *Synthesis and design of reactive distillation columns with two reactive sections*. Chemical Engineering research and design. 100 311-322.

PÀGINES WEB

- <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov> (Data de consulta: 17/03/16)
- www.sulzer.com (Data de consulta: 1/05/16)
- www.rtvpe.com (Data de consulta: 1/05/16)
- www.lacova.upc.es (Data de consulta: 1/05/16)
- www.ugr.es/~focana/dfar/aplica/cinetiHidroli/cinetiHidroliAcMet.pdf (Data de consulta: 3/05/16)
- www.vadequimica.com (Data de consulta: 8/05/16)
- www.afora.com (Data de consulta: 19/05/16)
- www.ddbst.com (Data de consulta: 22/05/16)
- <http://www.insht.es/InshtWeb/Contenidos/Documentacion/FichasTecnicas/FISQ/Ficheros/501a600/nspn0507.pdf> (Data de consulta: 22/05/16)
- www.aspentech.com (Data de consulta: 22/05/16)
- <http://rodin.uca.es/xmlui/bitstream/handle/10498/6415/33267601.pdf;jsessionid=05CA250B1EA425FFB038F87EF85A8076?sequence=1> (Data de consulta: 24/6/16)
- <http://www.temppco.com/Catalog/Section%2011-pdf/Chemical%20Bath.pdf> (Data de consulta: 29/06/16)

- <http://equinlabsac.com> (Data de consulta: 30/06/16)
- <http://www2.emersonprocess.com> (Data de consulta: 01/07/16)
- <http://es.mt.com/dam/Analytical/Titration/> (Data de consulta: 01/07/2016)
- www.salvadorescoda.com (Data de consulta: 01/07/2016)
- www.gunt.de (Data de consulta: 01/07/2016)
- www.aco.es (Data de consulta: 01/07/2016)
- www.polyscience.com (Data de consulta: 01/07/2016)
- www.plastoquimica.com (Data de consulta: 01/07/2016)
- <http://www.multimet.net/pdf/clasificacionaceros.pdf> (Data de consulta: 02/07/2016)
- www.lowara.com (Data de consulta: 02/07/2016)
- www.huber.com (Data de consulta: 02/07/2016)
- www.lestlab.es (Data de consulta: 02/07/2106)
- <http://www.eis.uva.es/~macromol/curso07-08/pe/polietileno%20de%20alta%20densidad.htm>
(Data de consulta: 03/07/2016)

13. TREBALL DE FUTUR









En aquest projecte s'ha estudiat de manera teòrica i per una reacció en concret, una columna de destil·lació reactiva i posteriorment s'ha dissenyat la planta de la mateixa per poder-la implantar al laboratori. Com a propostes de futur, primer de tot s'hauria d'implantar aquesta planta. Un cop implantada veure quins són els resultats experimentals per aquesta columna i per aquesta reacció. Altres propostes que es podrien plantejar són: provar de canviar la reacció i veure quins resultats s'obtenen per la mateixa columna però per una altre reacció o bé, per la mateixa reacció, tal com he fet teòricament amb el programa de simulació per la columna d'escala industrial, anar variant paràmetres i condicions d'operació i fer un estudi exhaustiu de com afecten aquests a la puresa de l'acetat de metil.

14. APÈNDIX

A. Fitxes de Seguretat pels reactius i productes de la reacció

A.1 Àcid Acètic

Fichas Internacionales de Seguridad Química

ÁCIDO ACÉTICO			ICSC: 0363 Mayo 2010	
CAS: RTECS: NU: CE Índice Anexo I: CE / EINECS:	64-19-7 AF1225000 2789 607-002-00-6 200-580-7	Ácido acético glacial Ácido etanoico Ácido etílico Ácido metanocarboxílico C ₂ H ₄ O ₂ / CH ₃ COOH Masa molecular: 60.1		
TIPO DE PELIGRO / EXPOSICIÓN	PELIGROS AGUDOS / SÍNTOMAS	PREVENCIÓN	PRIMEROS AUXILIOS / LUCHA CONTRA INCENDIOS	
INCENDIO	Inflamable.	Evitar las llamas, NO producir chispas y NO fumar.	Polvo, espuma resistente al alcohol, agua pulverizada o dióxido de carbono.	
EXPLOSIÓN	Por encima de 39°C pueden formarse mezclas explosivas vapor/aire. Riesgo de incendio y explosión en contacto con oxidantes fuertes.	Por encima de 39°C, sistema cerrado, ventilación y equipo eléctrico a prueba de explosión.	En caso de incendio: mantener fríos los bidones y demás instalaciones rociando con agua.	
EXPOSICIÓN		¡EVITAR TODO CONTACTO!	¡CONSULTAR AL MÉDICO EN TODOS LOS CASOS!	
Inhalación	Dolor de garganta. Tos. Sensación de quemazón. Dolor de cabeza. Vértigo. Jadeo. Dificultad respiratoria.	Ventilación, extracción localizada o protección respiratoria.	Aire limpio, reposo. Posición de semiincorporado. Proporcionar asistencia médica.	
Piel	Dolor. Enrojecimiento. Quemaduras cutáneas. Ampollas.	Guantes de protección. Traje de protección.	Quitar las ropas contaminadas. Aclarar la piel con agua abundante o ducharse durante 15 minutos como mínimo. Proporcionar asistencia médica.	
Ojos	Enrojecimiento. Dolor. Quemaduras graves. Pérdida de visión.	Pantalla facial o protección ocular combinada con protección respiratoria.	Enjuagar con agua abundante durante varios minutos (quitar las lentes de contacto si puede hacerse con facilidad). Proporcionar asistencia médica inmediatamente.	
Ingestión	Dolor de garganta. Sensación de quemazón. Dolor abdominal. Vómitos. Shock o colapso.	No comer, ni beber, ni fumar durante el trabajo.	Enjuagar la boca. NO provocar el vómito. Dar a beber un vaso pequeño de agua, pocos minutos después de la ingestión. Proporcionar asistencia médica inmediatamente.	
DERRAMES Y FUGAS			ENVASADO Y ETIQUETADO	
Eliminar toda fuente de ignición. Protección personal: traje de protección química, incluyendo equipo autónomo de respiración. Recoger el líquido procedente de la fuga en recipientes precintables. Neutralizar con precaución el líquido derramado con carbonato sódico, solo bajo la responsabilidad de un experto. NO permitir que este producto químico se incorpore al ambiente.			No transportar con alimentos y piensos. Clasificación UE Símbolo: C R: 10-35 S: (1/2)-23-26-45 Nota: B Clasificación NU Clasificación de Peligros NU: 8 Riesgos Subsidiarios de las NU: 3 Grupo de Envasado NU: II Clasificación GHS Peligro Líquidos y vapores inflamables. Nocivo si se inhala el vapor. Nocivo en contacto con la piel. Puede ser nocivo en caso de ingestión. Provoca graves quemaduras en la piel y lesiones oculares. Puede provocar irritación respiratoria. Provoca daños en el sistema respiratorio tras exposiciones prolongadas o repetidas si se inhala. Nocivo para los organismos acuáticos.	
RESPUESTA DE EMERGENCIA			ALMACENAMIENTO	
Código NFPA: H3; F2; R0			A prueba de incendio. Separado de oxidantes fuertes, ácidos fuertes, bases fuertes, alimentos y piensos. Mantener en lugar bien ventilado. Bien cerrado. Almacenar en el recipiente original. Almacenar en un área sin acceso a desagües o alcantarillas.	
Preparada en el Contexto de Cooperación entre el IPCS y la Comisión Europea © CE, IPCS, 2010				
<div><div>IPCS International Programme on Chemical Safety</div><div>WHO</div><div></div><div>UNEP</div><div></div><div>MINISTERIO DE TRABAJO E INMIGRACIÓN</div><div>INSTITUTO NACIONAL DE SEGURIDAD E HIGIENE EN EL TRABAJO</div></div>				









VÉASE INFORMACIÓN IMPORTANTE AL DORSO

Fichas Internacionales de Seguridad Química

<div> <div>ÁCIDO ACÉTICO</div> <div>ICSC: 0363</div> </div>	
DATOS IMPORTANTES	
ESTADO FÍSICO; ASPECTO Líquido incoloro de olor acre.	VÍAS DE EXPOSICIÓN Efectos locales graves
PELIGROS QUÍMICOS La sustancia es un ácido débil. Reacciona violentamente con oxidantes fuertes originando peligro de incendio y explosión. Reacciona violentamente con bases fuertes, ácidos fuertes y muchos otros compuestos. Ataca a algunos tipos de plásticos, caucho y revestimientos.	RIESGO DE INHALACIÓN Por evaporación de esta sustancia a 20°C se puede alcanzar bastante rápidamente una concentración nociva en el aire.
LÍMITES DE EXPOSICIÓN TLV: 10 ppm como TWA; 15 ppm como STEL (ACGIH 2010). LEP UE: 10 ppm; 25 mg/m³ como TWA (EU 1991).	EFFECTOS DE EXPOSICIÓN DE CORTA DURACIÓN La sustancia es corrosiva para los ojos, la piel y el tracto respiratorio. Corrosivo por ingestión. La inhalación puede causar edema pulmonar, pero sólo tras producirse los efectos corrosivos iniciales en los ojos o las vías respiratorias.
	EFFECTOS DE EXPOSICIÓN PROLONGADA O REPETIDA El contacto prolongado o repetido con la piel puede producir dermatitis. Los pulmones pueden resultar afectados tras exposiciones prolongadas o repetidas a un aerosol de esta sustancia. Riesgo de erosión de los dientes tras exposiciones prolongadas o repetidas al aerosol de esta sustancia.
PROPIEDADES FÍSICAS	
Punto de ebullición: 118°C Punto de fusión: 16.7°C Densidad relativa (agua = 1): 1.05 Solubilidad en agua: miscible. Presión de vapor, kPa a 20°C: 1.5 Densidad relativa de vapor (aire = 1): 2.1	Densidad relativa de la mezcla vapor/aire a 20°C (aire = 1): 1.02 Punto de inflamación: 39°C c.c. Temperatura de autoignición: 485°C Límites de explosividad, % en volumen en el aire: 6.0-17 Coeficiente de reparto octanol/agua como log Pow: -0.17
DATOS AMBIENTALES	
La sustancia es nociva para los organismos acuáticos.	
NOTAS	
El nº NU 2789 corresponde al ácido acético, ácido acético glacial o un disolución de ácido acético con más del 80 % de ácido en peso. Otro nº NU: NU 2790 disolución de ácido acético (entre el 10 y el 80% de ácido acético en peso); clasificación de peligro NU 8, grupo de envasado II-III.	
INFORMACIÓN ADICIONAL	
Límites de exposición profesional (INSHT 2011): VLA-ED: 10 ppm; 25 mg/m³ VLA-EC: 15 ppm, 37 mg/m³	
NOTA LEGAL	Esta ficha contiene la opinión colectiva del Comité Internacional de Expertos del IPCS y es independiente de requisitos legales. Su posible uso no es responsabilidad de la CE, el IPCS, sus representantes o el INSHT, autor de la versión española.
© IPCS, CE 2010	

A.2 Metanol

Fichas Internacionales de Seguridad Química

METANOL			ICSC: 0057
			Abril 2000
Alcohol metílico		Carbinol	
CAS:	67-56-1	CH ₄ O / CH ₃ OH	 
RTECS:	PC1400000	Masa molecular: 32.0	
NU:	1230		
CE Índice Anexo I:	603-001-00-X		
CE / EINECS:	200-659-6		
TIPO DE PELIGRO / EXPOSICIÓN	PELIGROS AGUDOS / SÍNTOMAS	PREVENCIÓN	PRIMEROS AUXILIOS / LUCHA CONTRA INCENDIOS
INCENDIO	Altamente inflamable. Ver Notas.	Evitar las llamas, NO producir chispas y NO fumar. NO poner en contacto con oxidantes.	Polvo, espuma resistente al alcohol, agua en grandes cantidades, dióxido de carbono.
EXPLOSIÓN	Las mezclas vapor/aire son explosivas.	Sistema cerrado, ventilación, equipo eléctrico y de alumbrado a prueba de explosión. NO utilizar aire comprimido para llenar, vaciar o manipular. Utilícense herramientas manuales no generadoras de chispas.	En caso de incendio: mantener fríos los bidones y demás instalaciones rociando con agua.
EXPOSICIÓN		¡EVITAR LA EXPOSICION DE ADOLESCENTES Y NIÑOS!	
Inhalación	Tos. Vértigo. Dolor de cabeza. Náuseas. Debilidad. Alteraciones de la vista.	Ventilación. Extracción localizada o protección respiratoria.	Aire limpio, reposo. Proporcionar asistencia médica.
Piel	¡PUEDE ABSORBERSE! Piel seca. Enrojecimiento.	Guantes de protección. Traje de protección.	Quitar las ropas contaminadas. Aclarar con agua abundante o ducharse. Proporcionar asistencia médica.
Ojos	Enrojecimiento. Dolor.	Gafas ajustadas de seguridad, o protección ocular combinada con la protección respiratoria.	Enjuagar con agua abundante durante varios minutos (quitar las lentes de contacto si puede hacerse con facilidad), después proporcionar asistencia médica.
Ingestión	Dolor abdominal. Jadeo. Vómitos. Convulsiones. Pérdida del conocimiento (para mayor información, véase Inhalación).	No comer, ni beber, ni fumar durante el trabajo. Lavarse las manos antes de comer.	Provocar el vómito (¡UNICAMENTE EN PERSONAS CONSCIENTES!). Proporcionar asistencia médica.
DERRAMES Y FUGAS		ENVASADO Y ETIQUETADO	
Evacuar la zona de peligro. Ventilar. Recoger el líquido procedente de la fuga en recipientes precintables. Eliminar el residuo con agua abundante. Eliminar vapor con agua pulverizada. Traje de protección química, incluyendo equipo autónomo de respiración.		No transportar con alimentos y piensos. Clasificación UE Símbolo: F, T R: 11-23/24/25-39/23/24/25; S: (1/2-)-7-16-36/37-45 Clasificación NU Clasificación de Peligros NU: 3 Riesgos Subsidiarios de las NU: 6.1; Grupo de Envasado NU: II	
RESPUESTA DE EMERGENCIA		ALMACENAMIENTO	
Ficha de emergencia de transporte (Transport Emergency Card): TEC (R)-30S1230. Código NFPA: H 1; F 3; R 0;		A prueba de incendio. Separado de oxidantes fuertes, alimentos y piensos. Mantener en lugar fresco.	
<div><div><div>IPCS International Programme on Chemical Safety</div><div></div></div><div>Preparada en el Contexto de Cooperación entre el IPCS y la Comisión Europea © IPCS, CE 2000</div></div>			

VÉASE INFORMACIÓN IMPORTANTE AL DORSO

Fichas Internacionales de Seguridad Química

METANOL

ICSC: 0057

DATOS IMPORTANTES

ESTADO FÍSICO; ASPECTO:

Líquido incoloro, de olor característico.

PELIGROS FÍSICOS:

El vapor se mezcla bien con el aire, formándose fácilmente mezclas explosivas.

PELIGROS QUÍMICOS:

Reacciona violentamente con oxidantes, originando peligro de incendio y explosión.

LÍMITES DE EXPOSICIÓN:

TLV: 200 ppm como TWA, 250 ppm como STEL; (piel); BEI establecido (ACGIH 2004).

MAK: Riesgo para el embarazo: grupo (DFG 2004).

LEP UE: 200 ppm; 260 mg/m³ como TWA (piel) como TWA (UE 2006).

VÍAS DE EXPOSICIÓN:

La sustancia se puede absorber por inhalación, a través de la piel y por ingestión.

RIESGO DE INHALACIÓN:

Por evaporación de esta sustancia a 20 °C se puede alcanzar bastante rápidamente una concentración nociva en el aire.

EFFECTOS DE EXPOSICIÓN DE CORTA DURACIÓN:

La sustancia irrita los ojos la piel y el tracto respiratorio. La sustancia puede afectar al sistema nervioso central, dando lugar a pérdida del conocimiento. La exposición puede producir ceguera y muerte. Los efectos pueden aparecer de forma no inmediata.

EFFECTOS DE EXPOSICIÓN PROLONGADA O REPETIDA:

El contacto prolongado o repetido con la piel puede producir dermatitis. La sustancia puede afectar sistema nervioso central, dando lugar a dolores de cabeza persistentes y alteraciones de la visión.

PROPIEDADES FÍSICAS

Punto de ebullición: 65 °C

Punto de fusión: -98 °C

Densidad relativa (agua = 1): 0.79

Solubilidad en agua: miscible

Presión de vapor, kPa a 20 °C: 12.3

Densidad relativa de vapor (aire = 1): 1.1

Densidad relativa de la mezcla vapor/aire a 20 °C (aire = 1): 1.01

Punto de inflamación: 12 °C c.c.

Temperatura de autoignición: 464 °C

Límites de explosividad, % en volumen en el aire: 5.5-44

Coefficiente de reparto octanol/agua como log Pow: -0.82/-0.66

DATOS AMBIENTALES

NOTAS

Arde con llama azulada. Está indicado examen médico periódico dependiendo del grado de exposición. Esta ficha ha sido parcialmente actualizada en octubre de 2006: ver Límites de exposición.

INFORMACIÓN ADICIONAL

Límites de exposición profesional (INSHT 2011):

VLA-ED: 200 ppm; 266 mg/m³

Notas: vía dérmica.

VLB: 15 mg/L en orina. Notas F, I.

Nota legal

Esta ficha contiene la opinión colectiva del Comité Internacional de Expertos del IPCS y es independiente de requisitos legales. Su posible uso no es responsabilidad de la CE, el IPCS, sus representantes o el INSHT, autor de la versión española.




© IPCS, CE 2000

A.3 Acetat de Metil

Fichas Internacionales de Seguridad Química

ACETATO DE METILO

ICSC: 0507

 <p style="text-align: center;">ACETATO DE METILO Acido acético, éster metílico $\text{CH}_3\text{COOCH}_3$ Masa molecular: 74.1</p> <p>Nº CAS 79-20-9 Nº RTECS AZ9100000 Nº ICSC 0507 Nº NU 1231 Nº CE 607-021-00-X</p> <p style="text-align: right;"></p>			
TIPOS DE PELIGRO/ EXPOSICION	PELIGROS/ SINTOMAS AGUDOS	PREVENCION	PRIMEROS AUXILIOS/ LUCHA CONTRA INCENDIOS
INCENDIO	Altamente inflamable.	Evitar llama abierta, NO producir chispas y NO fumar.	Polvos, AFFF, espuma, dióxido de carbono.
EXPLOSION	Las mezclas vapor/aire son explosivas.	Sistema cerrado, ventilación, equipo eléctrico y de alumbrado a prueba de explosiones. Utilícense herramientas manuales no generadoras de chispa.	En caso de incendio: mantener fríos los bidones y demás instalaciones por pulverización con agua.
EXPOSICION			
• INHALACION	Tos, pesadez, dolor de cabeza, dolor de garganta, vómitos, pérdida de conocimiento. (Síntomas de efectos no inmediatos: véanse Notas).	Ventilación, extracción localizada o protección respiratoria.	Aire limpio, reposo, posición de semiincorporado, respiración artificial si estuviera indicada y someter a atención médica.
• PIEL	Piel seca, enrojecimiento, aspereza.	Guantes protectores, traje de protección.	Quitar las ropas contaminadas, aclarar la piel con agua abundante o ducharse y solicitar atención médica.
• OJOS	Enrojecimiento, dolor, visión borrosa.	Gafas ajustadas de seguridad.	Enjuagar con agua abundante durante varios minutos (quitar las lentes de contacto si puede hacerse con facilidad), después consultar a un médico.
• INGESTION	Dolor abdominal, pesadez, náusea, vómitos, debilidad.	No comer, beber ni fumar durante el trabajo.	Enjuagar la boca, dar a beber abundante agua y someter a atención médica.
DERRAMAS Y FUGAS		ALMACENAMIENTO	ENVASADO Y ETIQUETADO
Recoger, en la medida de lo posible, el líquido que se derrama y el ya derramado en recipientes herméticos, absorber el líquido residual en arena o absorbente inerte y trasladarlo a un lugar seguro. NO permitir que este producto químico penetre en el ambiente. (Protección personal adicional: equipo autónomo de respiración).		A prueba de incendio. Separado de oxidantes fuertes, ácidos, bases. Mantener en lugar frío, seco. Herméticamente cerrado.	símbolo F símbolo Xi R: 11-36-66-67 S: (2-)16-26-29-33 Clasificación de Peligros NU: 3 Grupo de Envasado NU: II CE: <div style="text-align: right;">   </div>
VEASE AL DORSO INFORMACION IMPORTANTE			
ICSC: 0507		Preparada en el Contexto de Cooperación entre el IPCS y la Comisión de las Comunidades Europeas © CCE, IPCS, 1994	

Fichas Internacionales de Seguridad Química

ACETATO DE METILO

ICSC: 0507

D A T O S I M P O R T A N T E S	<p>ESTADO FISICO; ASPECTO Líquido incoloro, de olor característico.</p> <p>PELIGROS FISICOS El vapor es más denso que el aire y puede extenderse a ras del suelo; posible ignición en punto distante, y puede acumularse en los lugares excavados produciendo una deficiencia de oxígeno.</p> <p>PELIGROS QUIMICOS La sustancia se descompone al calentarla intensamente bajo la influencia de aire, bases, oxidantes fuertes, agua, luz UV, causando peligro de incendio o explosión. Ataca muchos metales en presencia de agua. Ataca plásticos.</p> <p>LIMITES DE EXPOSICION TLV (comoTWA): 200 ppm; 610 mg/m³ (ACGIH 1990-1991).</p>	<p>VIAS DE EXPOSICION La sustancia se puede absorber por inhalación del vapor, a través de la piel y por ingestión.</p> <p>RIESGO DE INHALACION Por evaporación de esta sustancia a 20°C se puede alcanzar bastante rápidamente una concentración nociva en el aire.</p> <p>EFFECTOS DE EXPOSICION DE CORTA DURACION La sustancia irrita los ojos, la piel y el tracto respiratorio. La inhalación del vapor puede originar edema pulmonar (véanse Notas). La sustancia puede tener efectos sobre el sistema nervioso, dando lugar a lesión del nervio óptico. La exposición muy por encima del OEL puede producir la muerte. Se recomienda vigilancia médica.</p> <p>EFFECTOS DE EXPOSICION PROLONGADA O REPETIDA El líquido desengrasa la piel.</p>
PROPIEDADES FISICAS	<p>Punto de ebullición a 101.3 kPa: 57°C Punto de fusión: -98°C Densidad relativa (agua = 1): 0.93 Solubilidad en agua, g/100 ml a 20°C: 24.4 Presión de vapor, kPa a 20°C: 21.7</p>	<p>Densidad relativa de vapor (aire = 1): 2.6 Densidad relativa de la mezcla vapor/aire a 20°C (aire = 1): 1.3 Punto de inflamación: -13°C Temperatura de autoignición: 455°C Límites de explosividad, % en volumen en el aire: 3.1-16</p>
DATOS AMBIENTALES	<p>Esta sustancia puede ser peligrosa para el ambiente; debería prestarse atención especial al agua.</p>	
NOTAS		
<p>Los síntomas del edema pulmonar no se ponen de manifiesto a menudo hasta pasadas algunas horas y se agravan por el esfuerzo físico. Reposo y vigilancia médica son por ello imprescindibles. Los síntomas de lesión del nervio óptico no se ponen de manifiesto hasta después de unas horas. En caso de envenenamiento con esta sustancia es necesario tratamiento específico; deben estar disponibles medios adecuados junto con instrucciones. Nombres Comerciales: Devoton, Tereton.</p>		
INFORMACION ADICIONAL		
FISQ: 2-006 ACETATO DE METILO		
ICSC: 0507		ACETATO DE METILO
© CCE, IPCS, 1994		
NOTA LEGAL IMPORTANTE:	<p>Ni la CCE ni la IPCS ni sus representantes son responsables del posible uso de esta información. Esta ficha contiene la opinión colectiva del Comité Internacional de Expertos del IPCS y es independiente de requisitos legales. La versión española incluye el etiquetado asignado por la clasificación europea, actualizado a la vigésima adaptación de la Directiva 67/548/CEE traspuesta a la legislación española por el Real Decreto 363/95 (BOE 5.6.95).</p>	

© INSHT

B. Procediment a seguir per dur a terme una operació de destil·lació reactiva en el HYSYS

En aquest apartat s'explicarà pas per pas com realitzar una operació de destil·lació reactiva en el programa de simulació utilitzat en aquest treball, el HYSYS.

Primer de tot hem de tenir instal·lat en el nostre ordinador el HYSYS, hi ha diverses versions, jo la que he fet servir és la del HYSYS.Plant.

Al obrir el HYSYS ens apareixerà la pantalla del treball, per començar un nou procés s'ha de clicar "New Case" que ho trobarem a dalt a l'esquerra.

Al clicar-ho se'ns obrirà aquesta finestra:

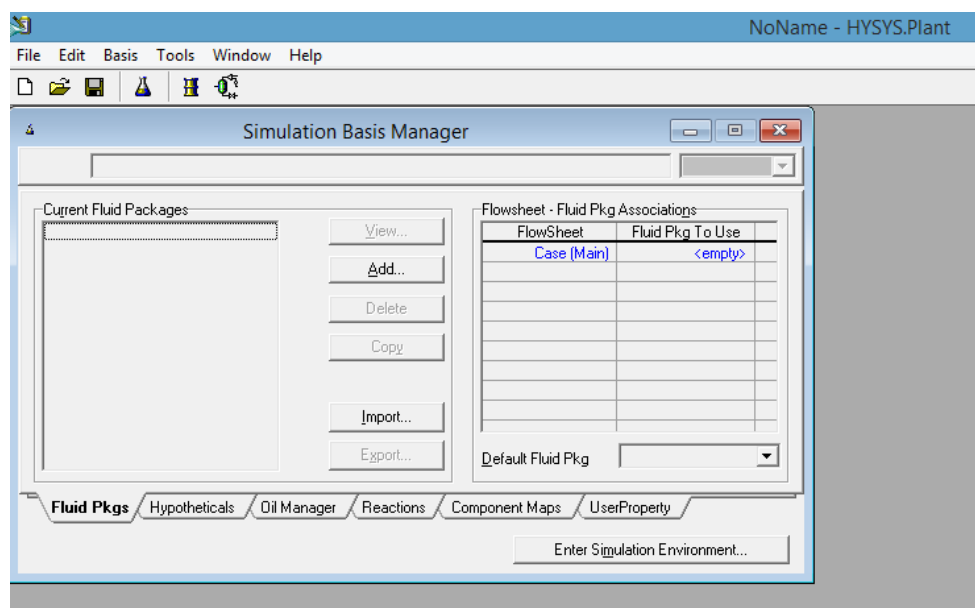


Figura B1
(Font HYSYS.Plant)

En aquesta finestra hem d'especificar el *Fluid Package* que volem utilitzar pel nostre procés, en el cas de la destil·lació reactiva el que recomanen utilitzar és el Wilson. Per afegir el Fluid Package cliquem "Add" i ens apareix:

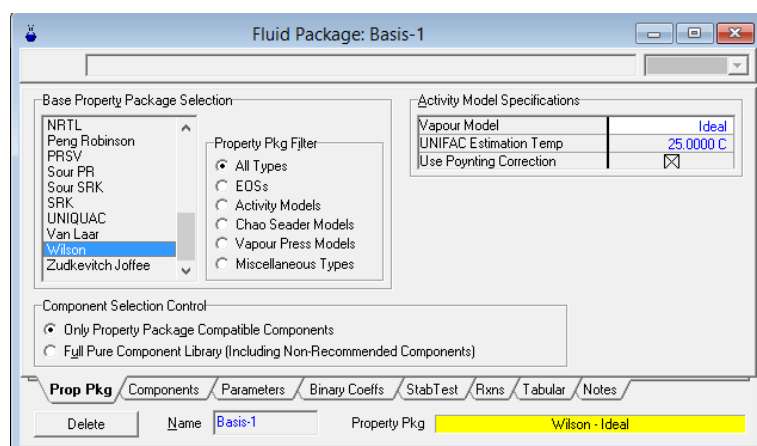


Figura B2
(Font HYSYS.Plant)

A continuació, sense tancar la finestra anterior ens posem en la pestanya dels components, allà haurem d'especificar els components que participaran en el nostre procés. En el meu cas: Metanol, Àcid Acètic, Acetat de Metil i Aigua.

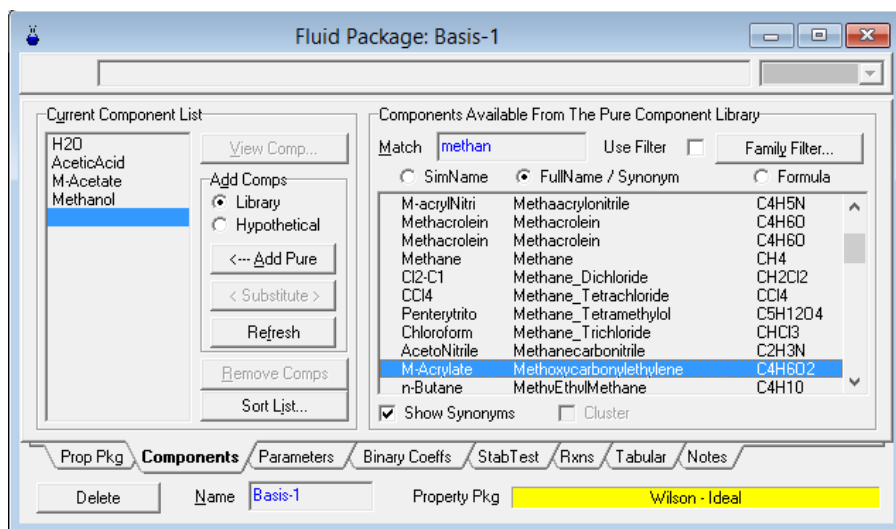


Figura B3
(Font HYSYS.Plant)

Un cop escollits els components, tanquem la finestra i cliquem *“Enter Simulation Environment”*

Ara ja ens trobem a la pantalla inicial per començar la simulació, a la dreta ens apareixerà una finestra amb les operacions i aparells que podem utilitzar:

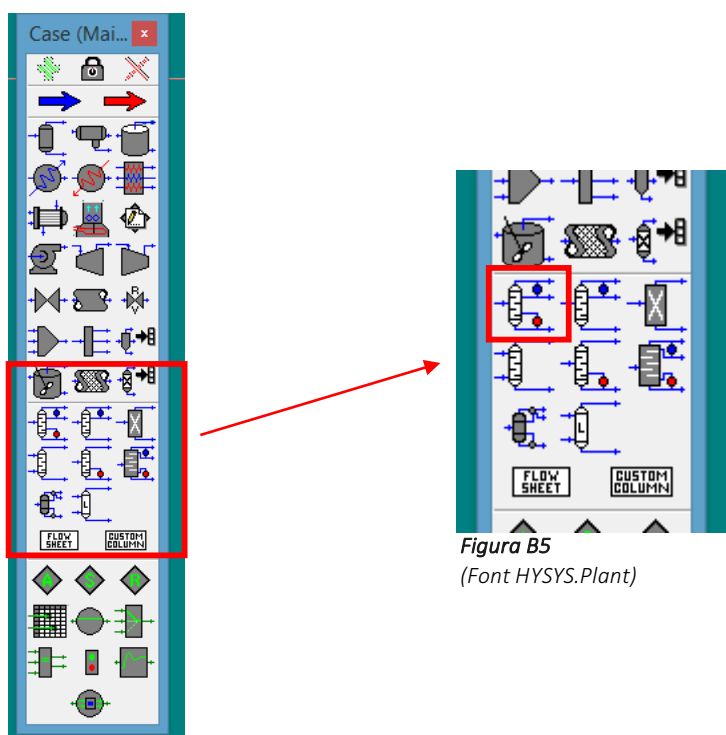


Figura B5
(Font HYSYS.Plant)

Figura B4
(Font HYSYS.Plant)

Com podem veure en la Figura B4 tenim: condensadors, evaporadors, columnes de destil·lació, columnes d'absorció, reactors, compressors, bombes...

La que ens interessa a nosaltres és la columna de destil·lació, la qual correspon a la icona marcada en la Figura B5

Abans però hem de seleccionar els aliments, per fer-ho hem de posar dos corrents amb la fletxa blava que es troba a la mateixa finestra.

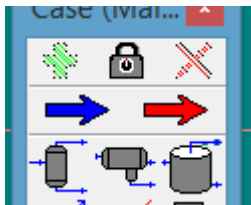


Figura B6
(Font HYSYS.Plant)

Quan posem aquesta fletxa en el nostre entorn de simulació, podem observar que la fletxa canvia de color a un blau cel, això és perquè encara no hem introduït les dades del corrent, per fer-ho cliquem dos cops a la fletxa i se'ns obre una finestra com aquesta:

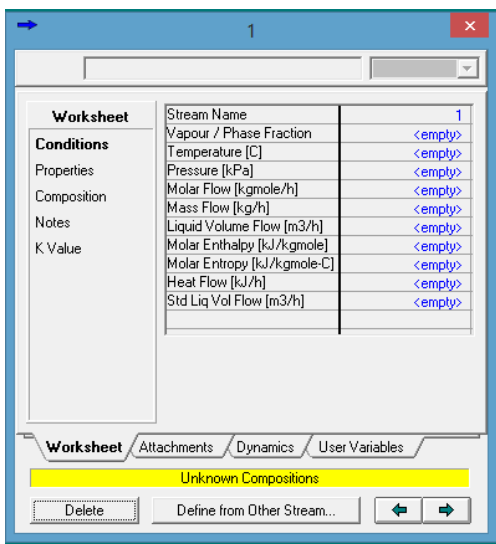


Figura B7
(Font HYSYS.Plant)

Aquí hem d'especificar el nom del corrent, la temperatura a la qual es troba, la pressió i el cabal màssic o molar. Seguidament, sense tancar la finestra del corrent en qüestió, clicarem en la pestanya que posa "Composition", que ens queda a l'esquerra i allà especificarem la fracció molar. En el nostre cas, les fraccions molars són 1 per ambdós aliments ja que considerem que són purs.

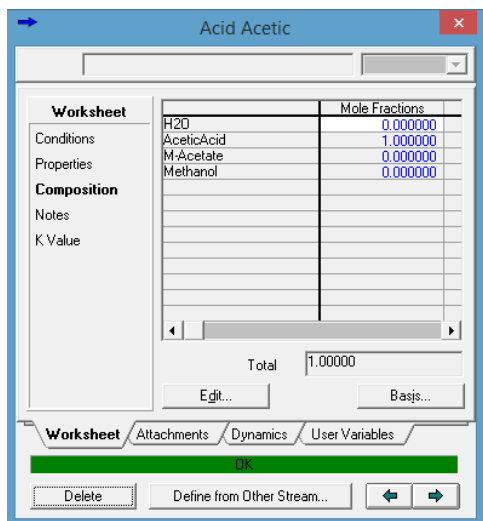


Figura B8
(Font HYSYS.Plant)

Ja podem tancar aquesta finestra i per definir l'altre aliment, fem exactament el mateix que per l'anterior. A continuació ja podem clicar sobre la columna de destil·lació i col·locar-la en la pantalla de simulació on tenim especificats els corrents d'alimentació. Veurem que la columna està resseguida de groc, això és perquè no li hem especificat els paràmetres ni condicions de treball i per tant està incompleta. Cliquem dos cops sobre la columna i se'ns obre la finestra següent on s'ha d'especificar:

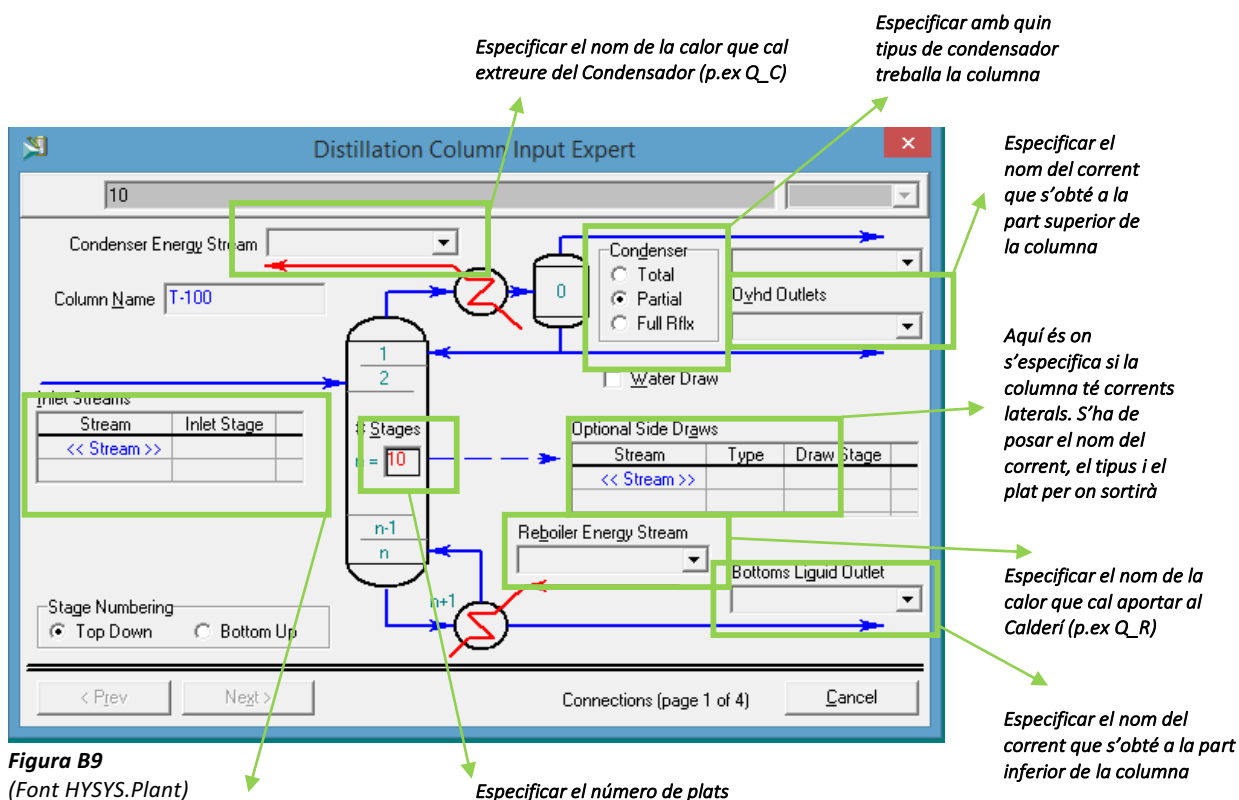


Figura B9
(Font HYSYS.Plant)

Quan ho haguem complimentat tot, el botó “Next” que apareix a sota se’ns habilitarà i podrem passar a donar les pressions del condensador i el calderí:

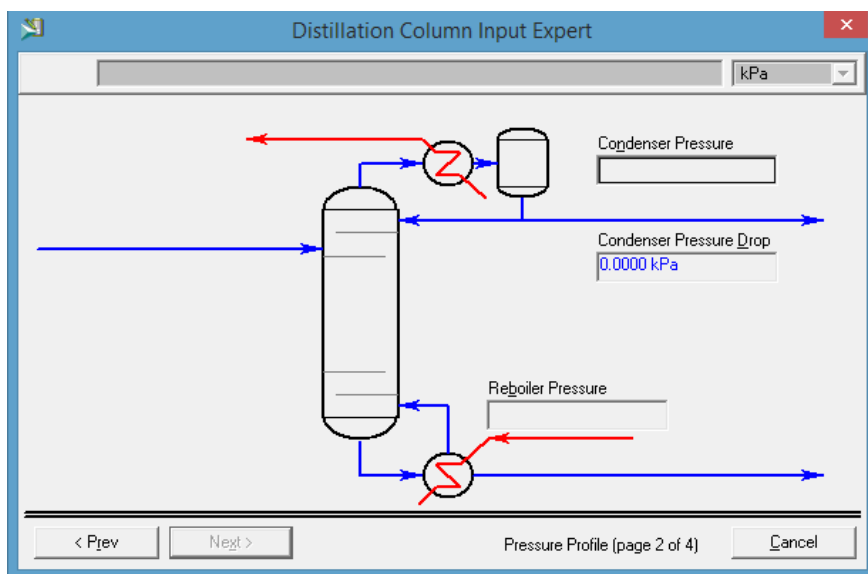


Figura B10
(Font HYSYS.Plant)

Si tornem a clicar “Next” ens passarà a una altra finestra on podrem especificar les temperatures estimades de sortida dels corrents, aquestes temperatures són opcionals, es poden posar o no. Tant si les poses com si no la columna tirarà endavant. I per últim, tornem a clicar el “Next” i aquí hauréu d’especificar el Reflux Ratio i el Cabal de Líquid que sortirà del condensador. Per finalitzar, cliquem “Done” i automàticament se’ns obra la finestra de treball de la columna.

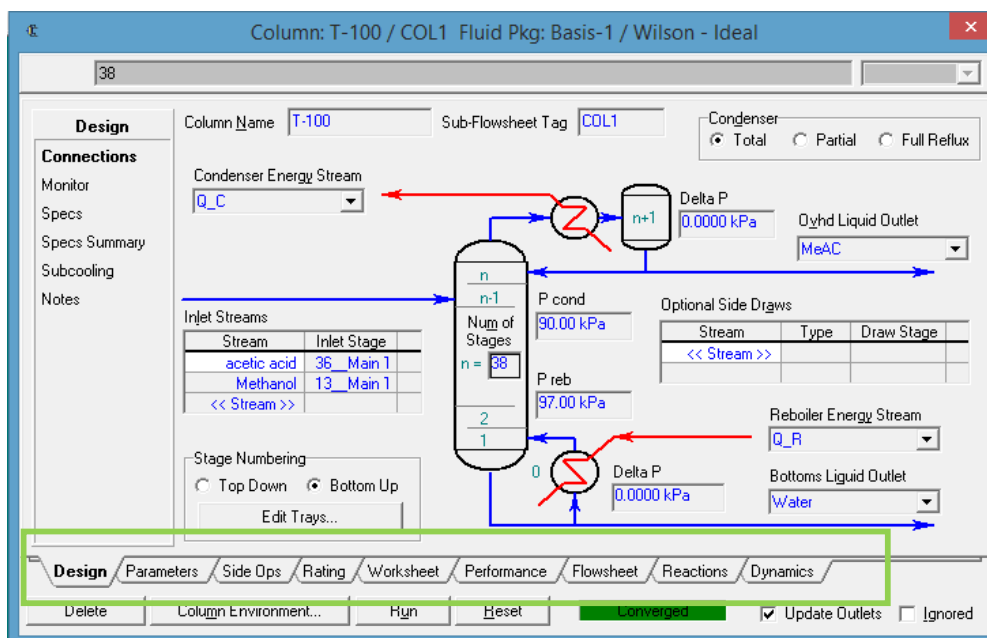


Figura B11
(Font HYSYS.Plant)

En aquesta finestra, es poden canviar tots els paràmetres que hem indicat anteriorment, es poden afegir, es poden veure els resultats obtinguts, es poden donar característiques més específiques pels plats, pel condensador, pel calderí...

Si ens fixem en el requadre de color verd que he situat en la Figura B11, és a través d'aquestes pestanyes per on es poden realitzar tots aquests canvis, a continuació explico breument que es pot fer en cada una de les pestanyes:

- *Design*

Aquest apartat és el principal, on indiques els paràmetres i les condicions de la columna, també es pot veure l'evolució de la temperatura, de la pressió i del cabal mitjançant gràfics a través de l'apartat "*Monitor*". Pots modificar el reflux, el cabal de destil·lat, afegir altres paràmetres. Et dóna els plats teòrics en els quals la teva columna treballa, en l'apartat de "*Notes*".

- *Parameters*

En aquest apartat pots veure amb valors, l'evolució plat per plat en quan a pressió, temperatura, quantitat de líquid, quantitat de vapor, les composicions dels components.

- *Side Ops*

Aquí s'especifiquen les característiques dels corrents laterals si és que la columna en té. També es poden veure els paràmetres dels corrents que van al condensador o al calderí.

- *Rating*

En aquest apartat es determinen les característiques dels plats, del calderí, del condensador, el diàmetre de la columna, la separació entre plats, etc.

- *Worksheet*

Aquí et dóna els valors de les composicions dels components de tots els corrents, també et proporciona algunes de les propietats físiques i químiques dels components en qüestió.

- *Performance*

Aquest apartat et proporciona els gràfics de l'evolució de la columna en quan a temperatura, pressió, cabal, composicions dels components, els valors de la K, propietats de transport. També et proporciona una taula de les entalpies plat per plat en l'apartat de "*Pinch*".

- *Flowsheet*

En aquest apartat et dóna les característiques dels cabals i els components

- *Reactions*

Aquí és on es vincula la reacció o les reaccions que vols que tinguin lloc dins la columna. També et proporciona una taula amb els valors de com evoluciona la reacció plat per plat.

- *Dynamics*

En aquest últim apartat et fa un resum de les característiques seleccionades pel calderí i pel condensador, també et dóna la opció de canviar-ho.

Per últim ens falta afegir la reacció a la columna, per fer-ho anem a la barra d'eines que es troba a la part superior de la pantalla de treball, cliquem en "*Flowsheet*" i dins d'aquest, cliquem "*Reaction Package*". Se'ns obre la següent finestra:

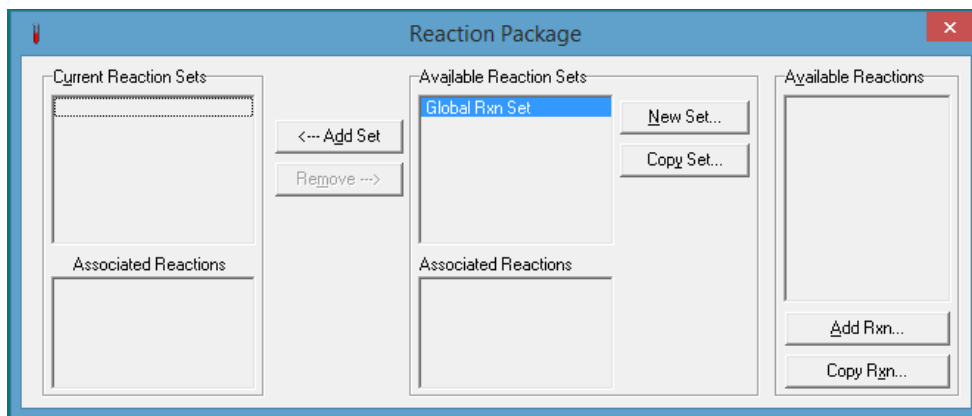


Figura B12
(Font HYSYS.Plant)

Per afegir la reacció, cliques el botó “Add Rxn” que apareix a la dreta a la part inferior, s’obra una finestra que ens demana que posem quin tipus de reacció és: d’equilibri, Conversió, Catàlisis Heterogènia, Cinètica o Simple. En el nostre cas, escollirem la d’equilibri.

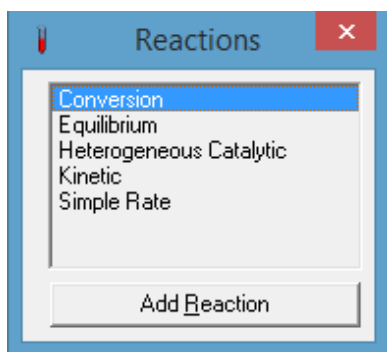


Figura B13
(Font HYSYS.Plant)

Cliquem “Add Reaction”. Apareix la corresponent finestra a omplir per una reacció d’equilibri:

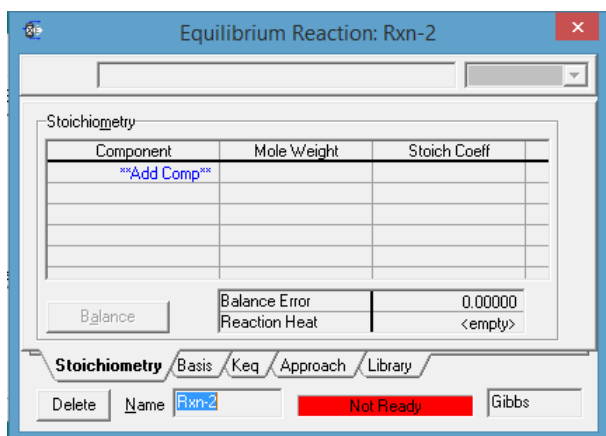


Figura B14
(Font HYSYS.Plant)

Afegeixes els components i els seus coeficients estequiomètrics de la reacció, en el nostre cas, serà 1 per l’acetat de metil i per l’aigua i -1 pel metanol i l’àcid acètic.

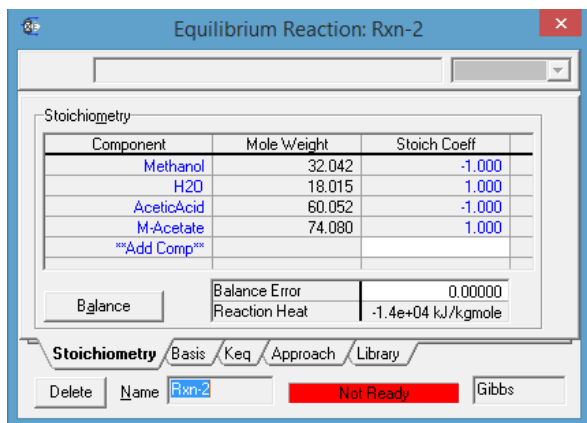


Figura B15
(Font HYSYS.Plant)

A continuació, ens dirigim a la pestanya que posa *Basis* i tal com s'ha explicat amb anterioritat, s'ha d'especificar com donarem la constant d'equilibri, pel nostre cas escollim l'opció de "*Keq vs T Table*".

Tenim la constant d'equilibri concretament per aquesta reacció a una temperatura determinada:

Temperatura (K)	Constant d'equilibri
363	16,76

Aquesta dada, l'he obtingut de l'article *Design of Reactive Distillations for Acetic Acid Esterification* que anomeno en la bibliografia.

Un cop hem omplert la taula amb la constant d'equilibri i la temperatura, ja podem tancar. La reacció ja està creada.

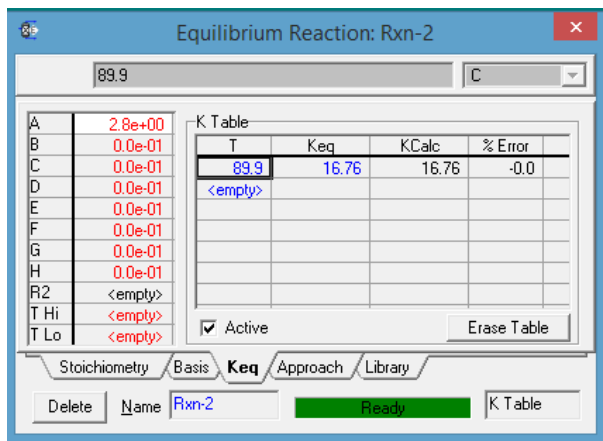


Figura B16
(Font HYSYS.Plant)

Ara la reacció s'ha de vincular a la columna. Per fer-ho tornem a clicar sobre la columna i se'ns torna a obrir la finestra dels paràmetres, condicions, etc. de la columna.

Anem a la pestanya que diu "*Reactions*". Allà haurem de clicar a "*New*" i se'ns obrirà aquesta finestra:

Figura B17
(Font HYSYS.Plant)

En l'apartat que posa "Reaction Set", a través de la fletxa ens ha de sortir la nostra Reacció i per tant la posem. Veurem que se'ns completa la part de la dreta amb les dades dels nostres components. Només ens faltaria detallar, per acabar, quin és la zona reactiva de la columna, entre quins plats es portarà a terme la reacció. Això es detalla en les dues pestanyes que posen: "First Stage" i "Last Stage". Especifiquem plats i comprovem que l'opció que posa "Active" estigui seleccionada, això vol dir que la reacció està vinculada amb la columna, que és el que nosaltres volem.

Ha de quedar així:

Figura B18
(Font HYSYS.Plant)

I per acabar, observem que la columna convergeixi, això vol dir que la columna pot realitzar el procés i que no te cap tipus de problema en calcular els resultats que s'obtenen. Si no et convergeix, voldrà dir que has de canviar paràmetres, la reacció no es pot realitzar, les pressions no són correctes, el número de plats no es suficient, etc. Hauràs de canviar alguna cosa del teu procés.

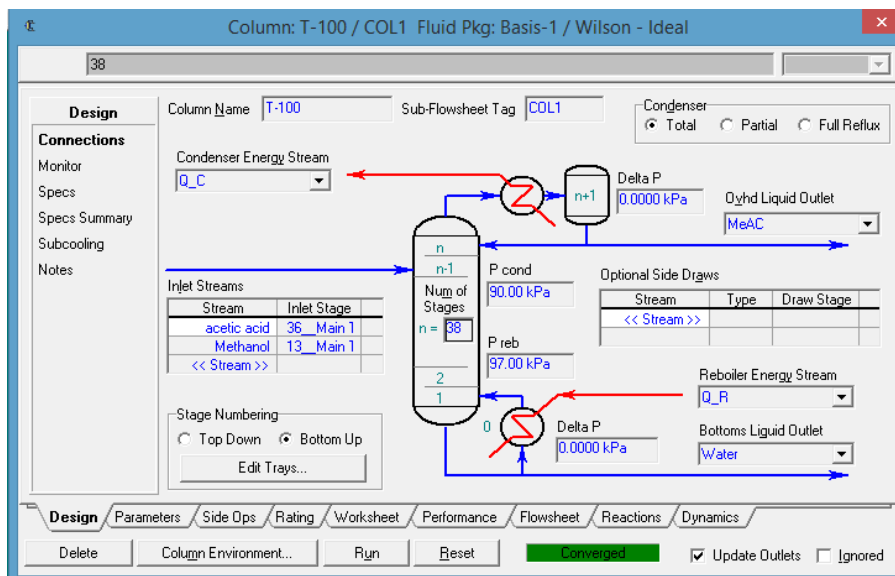


Figura B19
(Font HYSYS.Plant)

Per obtenir gràfics dels resultats o simplement valors del que s'obté, com ja he comentat abans, en la finestra dels paràmetres de la columna es pot obtenir aquesta informació:

Per obtenir gràfics tant de l'evolució de la pressió, de les composicions, del cabal, de la temperatura, etc. S'ha d'anar a la pestanya "Performance" i dins d'aquesta en l'apartat "Results".

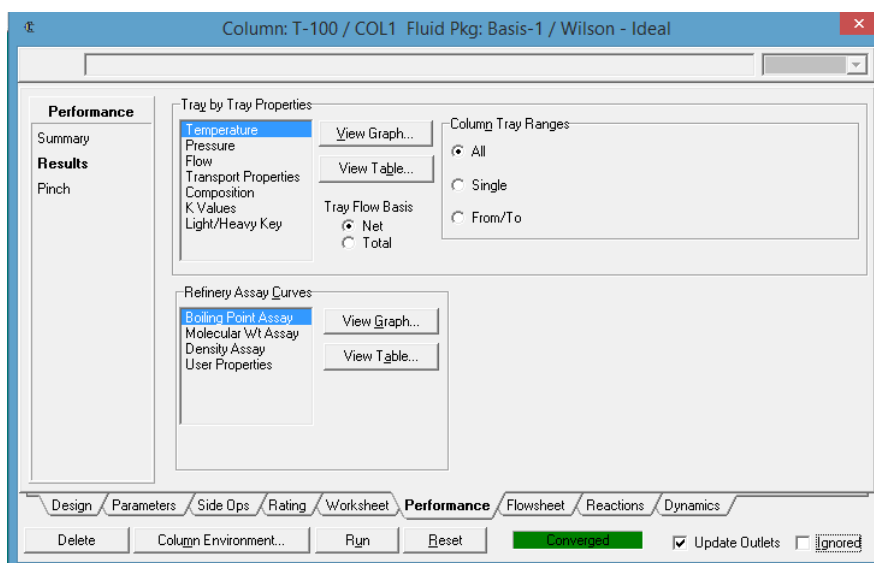
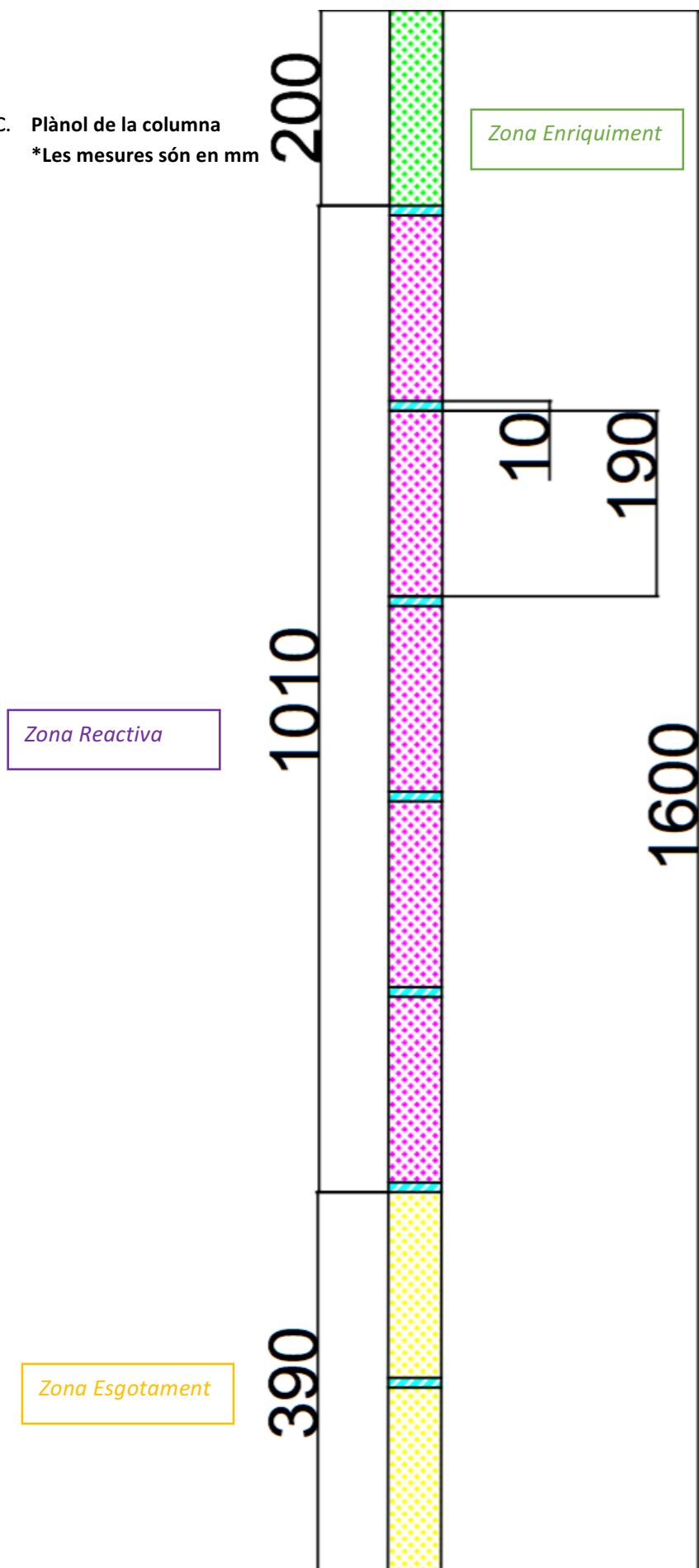


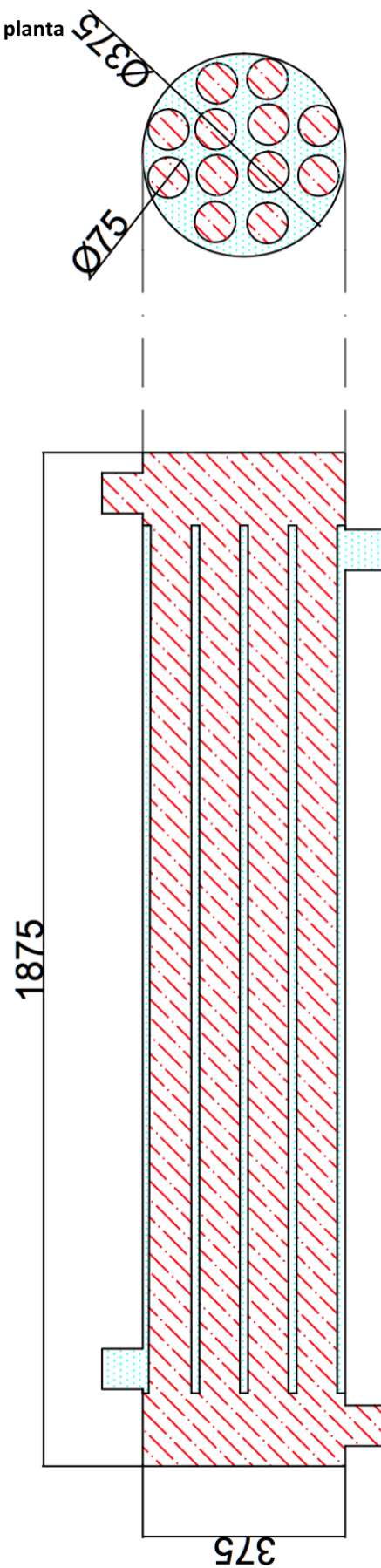
Figura B20
(Font HYSYS.Plant)

Per veure simplement els valors de les composicions de cada component en tots els corrents, s'ha d'anar a la pestanya "Worksheet" i dins d'aquesta en l'apartat "Compositions".

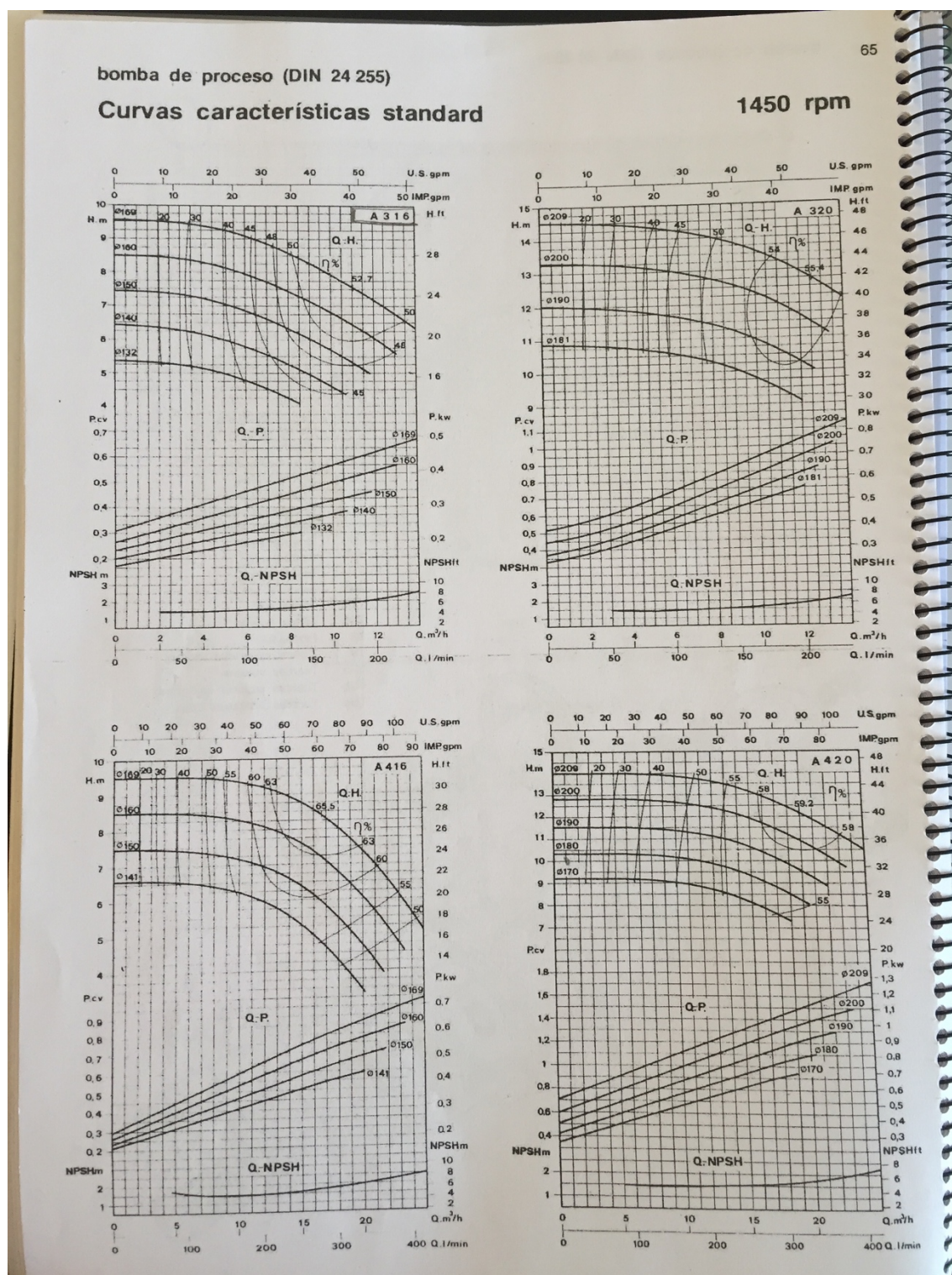
C. Plànol de la columna
*Les mesures són en mm



D. Plànol dels intercanviadors de calor de la planta
*La mesura real de l'intercanviador és 1/7.5



E. Corbes característiques d'una bomba centrífuga



Imatge F1: Corbes característiques segons la norma DIN 24 255

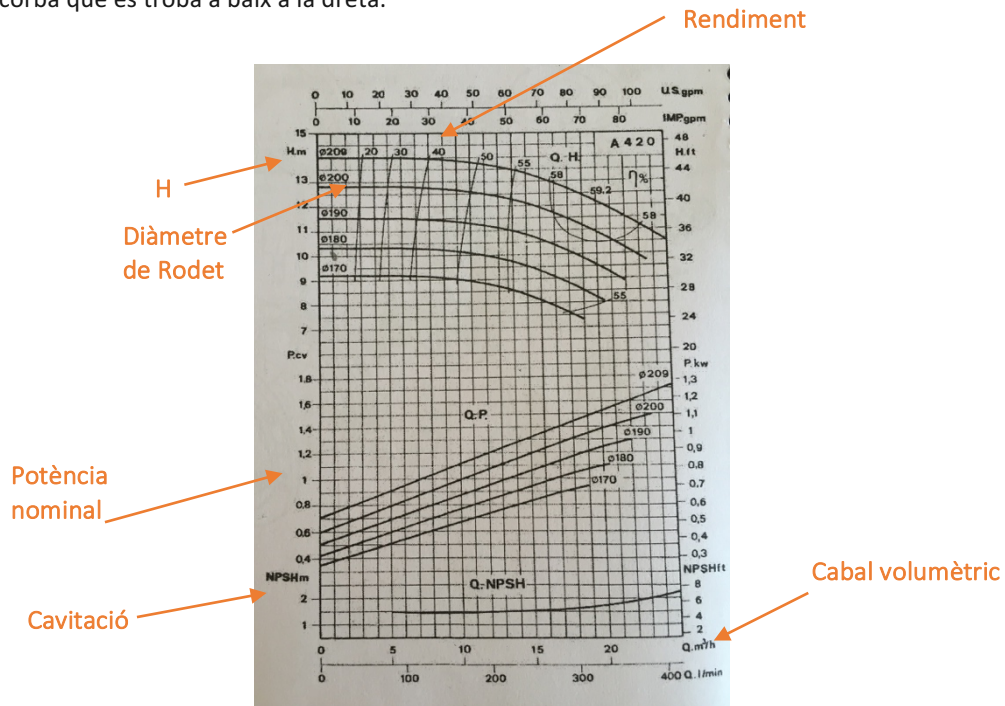
(Font: Bonsfills, A. (2015) Recull de dades d'enginyeria de transport de fluids i transmissió de la calor)

Per entrar a les corbes:

En el eix de les x → Cabal volumètric

En el eix de les y → H

Observem les 4 corbes que hi ha en la imatge F1 i veiem que la que més s'escala a les bombes de l'equip és la corba que es troba a baix a la dreta.

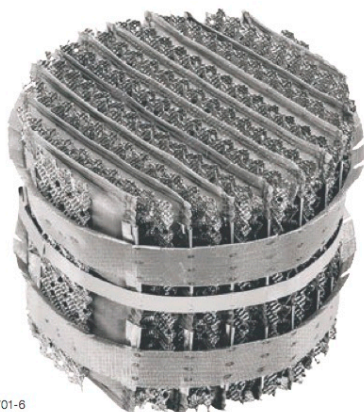


Imatge F2: Corba característica escollida per determinar les característiques de les bombes del nostre procés
(Font: Bonsfills, A. (2015) Recull de dades d'enginyeria de transport de fluids i transmissió de la calor)

F. Característiques del rebliment Katapak S
(Font: www.sulzer.es)

Katapak-SP

For reactive distillation



0600 2701-6

This packing was developed to be applied in reactive distillation processes. With the modular concept separation efficiency and catalyst volume fraction can be varied to perfectly fit the requirements of each specific process.

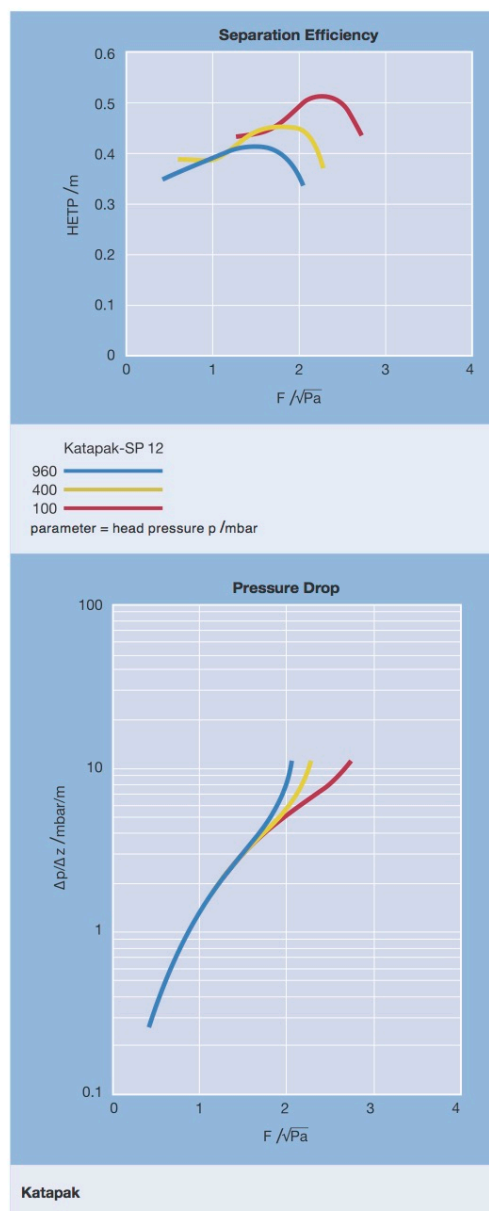
Other types are available on request. Largest diameter supplied to date: 2 m.

Special features

- Flexible design combining catalyst elements and MellapakPlus layers
- High separation efficiency
- High reaction capacity

Product applications

- Synthesis of acetates (e.g. butyl acetate)
- Hydrolysis of methyl acetate
- Synthesis of fatty acid esters
- Synthesis of acetals
- MTBE, ETBE, TAME



Laboratory packing

For small laboratory columns



0691 2532-2

Standard structured packings are hardly suitable for use in laboratory columns of less than 50 mm diameter. Sulzer laboratory packings are especially designed for this purpose.

Preferred applications:

- Laboratory columns from 20 to 80 mm
- Vacuum from 1 mbar
- Where a high number of theoretical stages is required (DX™, EX™)
- Distillation of components prone to decomposition
- Preliminary assessment of a separation task
- Deriving of reliable scale-up rules

Special features

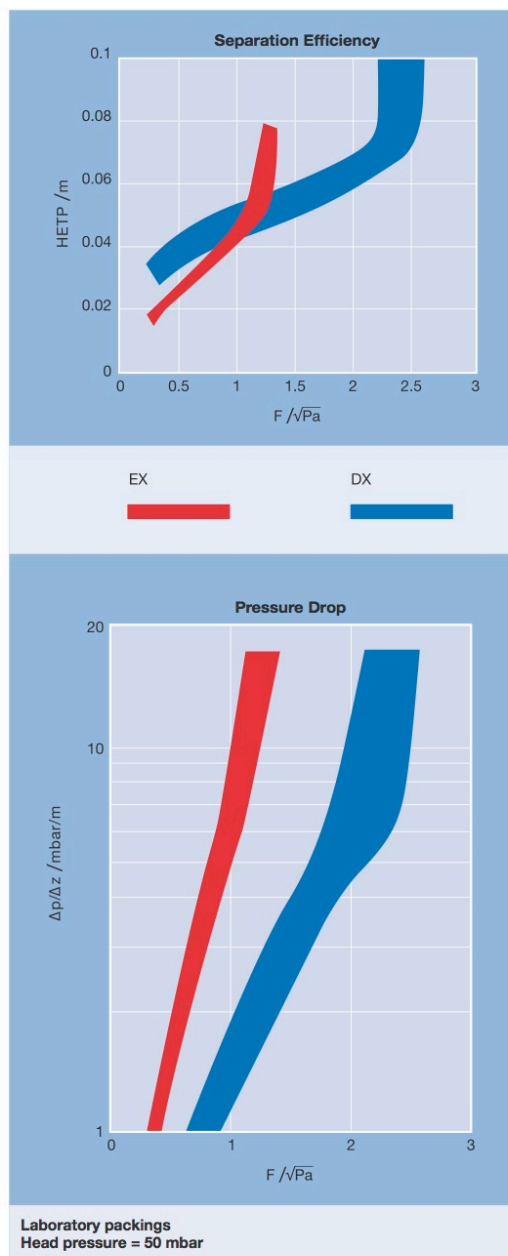
Type EX:

- Highest possible number of theoretical stages, even with very low liquid loadings
- Same pressure drop per theoretical stage as Sulzer BX packing
- Small hold-up
- Capacity nearly double that of wire mesh rings (3 x 3 mm)

Type DX: This packing has a coarser structure and hence a lower number of theoretical stages.

Suitable for laboratory columns where a modest number of theoretical stages is required, together with low pressure drop and high capacity.

Type DXM/DYM: These packing types, made of sheet metal, have a lower number of theoretical stages compared to DX. HETP or NTSM remain constant over a wide range of F factors and liquid loads. This makes scale-up significantly easier.



G. Característiques de l'acer AISI 316 i AISI 3104
(Font: www.aco.es)

Composició Química · Composição Química (%)

Calidad · Qualidade AISI	304	316
Carbono C MAX	0,08	0,03
Cromo · Crómio Cr	18 - 20	16 - 18
Níquel Ni	8 - 12	10 - 14
Manganeso · Manganésio Mn MAX	2,00	2,00
Silicio Si MAX	1,00	1,00
Azufre · Exofre S MAX	0,03	0,03
Fósforo P MAX	0,04	0,04
Molibdeno · Molibdénio Mo	-	2 - 3

Características Mecánicas y Físicas
Características Mecânicas e Físicas

Calidad · Qualidade AISI	304	316
Límite Elástico MIN (Kg/mm²)	21	21
Carga Rotura MIN (Kg/mm²)	52	52
Alargamiento MIN (%)	40	40
Dureza MAX	202	217
Peso Específico (g/cm³)	8,06	8,06
Calor Específico 0-100° (Kcal/kg·C)	0,12	0,12
Coefficiente Dilatación Térmica	17,30	16,00
Conductividad Térmica a 100°	0,039	0,039

- No son magnéticos.
- Tienen una estructura cúbica centrada en las caras y presentan excelentes propiedades de tenacidad, ductibilidad, resistencia a la corrosión y soldabilidad.
- Son los mas conocidos y utilizados.
- No se endurecen por tratamiento térmico, sino unicamente por deformación en frío o en caliente.
- Tienen una gran estabilidad estructural.

- Não são magnéticos.
- Apresentam uma estrutura cúbica centrada nas faces e excelentes propriedades de tenacidade, ductilidade, resistência à corrosão e soldabilidade.
- São os mais conhecidos e utilizados.
- Não são endurecidos por tratamento térmico, mas apenas por deformação a frio ou a quente.
- Apresentam uma elevada estabilidade estrutural.

Tabla de Resistencia a la Corrosión
Tabela de Resistência à Corrosão

Grado de Ataque	B	R	M
Pérdida de peso Perda de peso g/m²·h	< 0,1g	0,1 - 1,0g	> 1,0g
Pérdida de espesor Perda de espessura mm/año	< 0,11mm	0,11 - 1,1mm	> 1,1mm
Empleo del material Utilização do material	BUENO BOM*	REGULAR**	MALO MAU***

*Material completamente resistente.

**Algún ataque. Material utilizable en algunos casos · Algum ataque. Material utilizável em alguns casos

***Excesivo ataque. El material no debe utilizarse · Ataque excessivo. O material não deve ser utilizado

Medio Corrosivo Meio Corrosivo	Temperatura	AISI	
		304	316
Aceites · Óleos			
Minerales · Minerais	Todas Temperaturas	B	B
Vegetales · Vegetais	Todas Temperaturas	B	B
En presencia · Em presença SO ₂ H ₂	Caliente · Quente	M	R
Acetona			
Diluida / Concentrada	20°	B	B
Diluida / Concentrada	Ebullición · Ebulição	B	B
Ácido Acético			
20%	20°	B	B
	Ebullición · Ebulição	B	B
50%	20°	B	B
	Ebullición · Ebulição	R	B
Concentrado	70°	B	B
	Ebullición · Ebulição	R	B

Medio Corrosivo Meio Corrosivo	Temperatura	AISI	
		304	316
Ácido Bórico			
5%	20°	B	B
	Caliente · Quente	B	B
Ácido Butírico			
Diluido / Concentrado	Todas Temperaturas	B	B
Ácido Cítrico			
Diluido / Concentrado	20°	B	B
15%	Ebullición · Ebulição	R	B
20%	Ebullición · Ebulição	R	R
Ácido Clorídrico			
1%	20°	R	B
	50°	M	R
	Ebullición · Ebulição	M	R
Superior a 1%	Todas Temperaturas	M	M
Ácido Fluorhídrico			
Diluido / Concentrado	20° a 50°	M	M
Ácido Fórmico			
1%	20°	B	B
	Ebullición · Ebulição	B	B
10% a 90%	20°	B	B
	Ebullición · Ebulição	R	R
100%	20°	B	B
	Ebullición · Ebulição	B	B
Ácido Fosfórico			
1% a 5%	20°	B	B
	Ebullición · Ebulição	B	B
10%	20°	B	B
	Ebullición · Ebulição	B	B
25%	20°	B	B
	Ebullición · Ebulição	B	B
50% a 85%	20°	B	B
	Ebullición · Ebulição	R	R
Concentrado	20°	B	B
	Ebullición · Ebulição	M	M
Ácido Láctico · Lático			
10%	20°	B	B
	Ebullición · Ebulição	B	B
50%	20°	B	B
	Ebullición · Ebulição	R	B
100%	20°	B	B
	Ebullición · Ebulição	R	B
Ácido Nítrico			
10%	20°	B	B
	Ebullición · Ebulição	B	B
20%	20°	B	B
	Ebullición · Ebulição	B	B
50%	20°	B	B
	Ebullición · Ebulição	B	B
80% a 95%	20°	B	B
	Ebullición · Ebulição	M	M
95% a 100%	20°	R	R
	Ebullición · Ebulição	M	M
Ácido Oléico · Oleico			
Concentrado	20°	B	B
Ácido Oxálico			
10%	20°	B	B
	Ebullición · Ebulição	M	R
50% a 100%	20°	B	B
	Ebullición · Ebulição	M	R
Ácido Picrico			
20°		B	B
Ácido Sulfúrico			
1%	20-75°	R	B
	Ebullición · Ebulição	M	R
5% a 10%	20-50°	R	B
	Ebullición · Ebulição	M	M
20% a 50%	20-50°	M	M
	Ebullición · Ebulição	M	M
80%	20°	R	B
	Ebullición · Ebulição	M	M
95% a 100%	20°	B	B
	Ebullición · Ebulição	M	M
Ácido Tánico · Tânico			
10%	20°	B	B
	Ebullición · Ebulição	M	M
50%	20°	B	B
	Ebullición · Ebulição	B	B

Medio Corrosivo Meio Corrosivo	Temperatura	AISI	
		304	316
Ácido Úrico			
Concentrado	-	B	B
Agua Mar	35º	R	B
Agua Oxigenada	20º	B	B
Agua Potable · Potável	20º	B	B
	Ebullición · Ebulição	B	B
Alcoholes · Alcoóis	20º	B	B
Metílico, Etilico, Butílico	Ebullición · Ebulição	B	B
Aluminio · Alumínio	Fundido		
	20º	B	B
Amoniaco	Ebullición · Ebulição	B	B
Anilina	20º	B	B
Atmósferas · Atmosferas			
Interiores		B	B
Rurales · Rurais		B	B
Marinas		R	B
Industriales · Industriais		R	B
Azúcar · Açúcar	20º	B	B
	Ebullición · Ebulição	B	B
Azufre · Enxofre	20º	B	B
	Ebullición · Ebulição	B	B
Baños · Banhos Fotográficos			
		R	B
Baños Cromar		B	B
Banhos Cromagem	20º	B	B
Barniz · Verniz		B	B
Bebidas Carbónicas · Carbonatadas		B	B
Bencina · Benzina		B	B
Benzol · Benzeno		B	B
Bicarbonato Sódico · Sódio	20º	B	B
	70º	B	B
Bicromatos · Dicromatos			
Sódico, Plástico		B	B
Bisulfuro · Bissulforeto Carbono	20º	B	B
Cadmio · Cádmio	Fusión · Fusão		
Café	Ebullición · Ebulição	B	B
Carbonato Cálcico · Cálcio	20º	B	B
Carbonato Sódico · Sódio	20º	B	B
Cerveza · Cerveja	20º	B	B
Cianuros · Cianetos			
Mercurio, Plata, Potásico Mercúrio, Prata, Potássio		B	B
Cromatos			
Potásico · Potássico, Sódico		B	B
Cloro			
Gas · Gás seco	20º	B	B
Gas húmedo · Gás húmido	20º	M	M
Cloroformo · Clorofórmio	20º	B	B
Cloruro · Cloreto Amoniaco			
10%	20º	B	B
	Ebullición · Ebulição	R	B
Saturado	Ebullición · Ebulição	M	R
Cloruro · Cloreto Cálcico			
Saturado	20º	B	B
Saturado	Ebullición · Ebulição	R	B
Cloruro · Cloreto Férrico			
5% a 50%		M	M
Cloruro Potásico Cloreto Potássico	20º	B	B
Cloruro · Cloreto Sódico	20º	B	B
	Ebullición · Ebulição	B	B
Cloruro de Zinc · Zinco			
10%		R	B
Colas	20º	B	B
Estaño	Fusión · Fusão	M	M
Éter		B	B
Fuel-oil	Caliente · Quente	B	B
Neutro	Caliente · Quente	B	B
En presencia · Em presença SO ₂ H ₂	Caliente · Quente	M	R
Gasolina	20º	B	B
Gelatina		B	B
Glicerina	20º	B	B
	100º	B	B
Glicol Etilico		B	B
Glucosa · Glucose		B	B
Hidróxido de Amonio			
40%		B	B
Hidróxido Cálcico · Cálcio			
Hidróxido Férrico	20º	B	B
Hidróxido Plástico	20º	B	B
	Ebullición · Ebulição	B	B
Hipoclorito Cálcico			
Sódico, Plástico			
100%	Todas Temperaturas	M	M

Medio Corrosivo Meio Corrosivo	Temperatura	ANSI	
		304	316
Yodo · Iodo	20º	M	M
Yoduro Potásico Iodato Potássio	Ebullición · Ebulição	B	B
Jabones · Sabões	Ebullición · Ebulição	B	B
Jarabes · Xaropes	Ebullición · Ebulição	B	B
Jugos, Limón y Naranja Sucos, limão e laranja	Ebullición · Ebulição	B	B
Jugo · Sumo Tomate	20º	B	B
Queroseno · Querosene	20º	B	B
Leche · Leite			
Fresca	20º	B	B
	Ebullición · Ebulição	B	B
Fermentada, Agria · Azedo	20º	B	B
	Ebullición · Ebulição	B	B
Levadura · Levedure	20º	B	B
Mahonesa · Maionese	20º	B	B
Manteca · Manteiga	20º	B	B
Melaza · Melaço	20º	B	B
Mercurio · Mercúrio			
	20º	B	B
	50º	B	B
Mostaza · Mostarda	20º	B	B
Nitratos			
Todas Concentraciones	20º	B	B
Orina · Urina	20º	B	B
Parafina			
	20º	B	B
	Caliente · Quente	B	B
Pasta Alimenticia Massas Alimentares		B	B
Parmengano de Potásico · Potássio			
	20º	B	B
	Ebullición · Ebulição	B	B
Petróleo	20º	B	B
Plomo · Chumbo	Fusión · Fusão	R	R
Potasa · Potassa Cáustica			
	20º	B	B
	Ebullición · Ebulição	R	R
Propano		B	B
Quesos · Queijos	20º	B	B
Resina	Fusión · Fusão	B	B
Sangre · Sangue	20º	B	B
Sidra · Cidra	20º	B	B
Sosa · Soda Cáustica			
10%	20º	B	B
	Ebullición · Ebulição	B	B
50%	20º	B	B
	Ebullición · Ebulição	R	R
Suero Leche · Soro Leite	20º	B	B
Sulfato de Cobre			
50%	Ebullición · Ebulição	B	B
Sulfato Férrico			
10%	Ebullición · Ebulição	B	B
Sulfato Magnesio · Magnésio			
10%	20º	B	B
Sulfato Potásico · Potássio			
10%	Ebullición · Ebulição	B	B
Sulfato Sódico · Sódio			
	20º	B	B
Todas Concentraciones	Ebullición · Ebulição	B	B
Tetracloruro de Carbono Tetracloreto de Carbono			
	20º	B	B
Seco	Ebullición · Ebulição	B	B
10%	20º	M	M
Tintas			
	20º	B	B
	Ebullición · Ebulição	B	B
Tintura Yodo · Iodo	20º	M	M
Tricloretileno			
25%	20º	M	M
100%	20º	B	B
Vapor Agua · Água	300º	B	B
Vinagre			
	20º	B	B
	Ebullición · Ebulição	B	B
Vinos · Vinho			
Blanco · Branco	20º	R	B
Tinto	20º	B	B
Whisky	20º	B	B
Zinc · Zinco	Fusión · Fusão	M	M

*Los valores de esta tabla se refieren a material en estado decapado y pasivado. Los porcentajes de las concentraciones se refieren a los pesos de la sustancia en estado puro diluido en agua.
 *Os valores desta tabela referem-se a material em estado decapado e passivado. As percentagens das concentrações referem-se a pesos da substância em estado puro diluído em água.

H. Característiques generals d'un intercanviador de calor (Gunt Hamburg)
(Font:www.gunt.de)

Página 1/2
01/2016

ENERGY & ENVIRONMENT



WL 110.03 **Cambiador de Calor de Carcasa y Tubos**



* **Cambiador de calor de carcasa y tubos para conexión a la unidad de alimentación WL 110**

* **Los fluidos circulan en flujo cruzado**

y procesar con ayuda de una software de adquisición de datos. A continuación se determina el coeficiente de transferencia de calor medio como variable característica.

Descripción

Los cambiadores de calor de carcasa y tubos son un modelo muy difundido. Las ventajas de este modelo son la gran superficie de transmisión de calor y su fabricación sencilla. Los cambiadores de calor de carcasa y tubos se utilizan en la industria química y farmacéutica, en refinerías y en plantas de procesos.

WL 110.03 pertenece a una serie de equipos que hace posibles ensayos con diversos tipos de cambiadores de calor. El equipo de ensayo es idóneo para investigar el funcionamiento y el comportamiento de un cambiador de calor de carcasa y tubos.

WL 110.03 se conecta a unidad de alimentación WL 110 por medio de acoplamientos rápidos. El cambiador de calor de carcasa y tubos consta de siete tubos rodeados por un tubo envolvente transparente. El agua caliente fluye por el espacio del tubo y el agua fría por el espacio envolvente. El agua caliente transfiere así una parte de su energía térmica al agua fría. Con ayuda de deflectores se desvía la corriente en el espacio envolvente de manera que se origine una fuerte turbulencia y, con ello, una transferencia intensiva de calor. Los fluidos circulan continuamente en flujo cruzado. El caudal de agua caliente y el de agua fría se ajustan por medio de válvulas. La manguera de alimentación se puede cambiar de empalme con ayuda de acoplamientos rápidos, cambiando así la dirección del flujo. De este modo se puede trabajar en paralelo cruzado y en contracorriente cruzado. Sensores de temperatura para medición de la temperatura de entrada y salida se encuentran en las conexiones de alimentación de WL 110.

En los ensayos se capta la evolución de la temperatura y se representa gráficamente en forma de curvas. Los valores medidos se pueden captar

Contenido didáctico / Ensayos

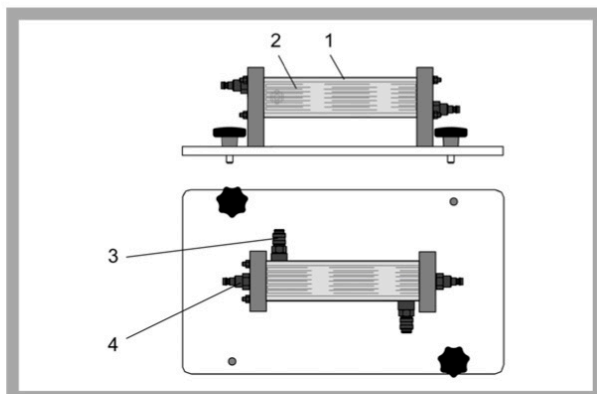
Junto con la unidad de alimentación WL 110

- funcionamiento y comportamiento de un cambiador de calor de carcasa y tubos
- registro de curvas de temperatura
 - * en flujo paralelo cruzado
 - * en flujo de contracorriente cruzado
- determinación de coeficientes globales de transferencia de calor medios
- comparación con otros tipos de cambiadores de calor

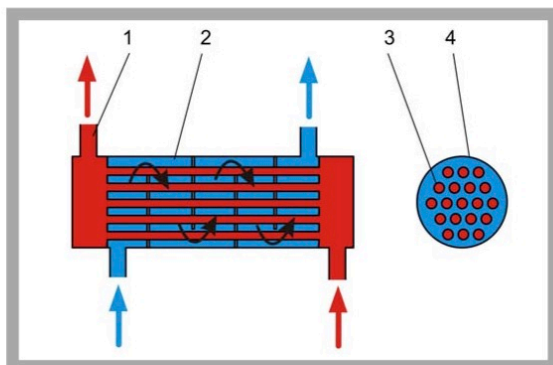


2E a division of G.U.N.T Gerätebau GmbH, Hanskampring 15-17, D-22885 Barsbüttel, t +49 40 67 08 54-0, f +49 40 67 08 54-42, E-mail sales@gunt.de
Nos reservamos el derecho de efectuar modificaciones técnicas sin previo aviso. Visit our Websites: www.gunt.de | www.gunt2e.de

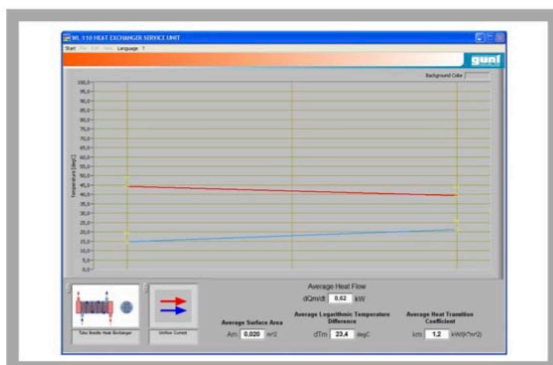
WL 110.03 **Cambiador de Calor de Carcasa y Tubos**



1 tubo envolvente transparente, 2 haz de tubos, 3 empalme de agua del tubo envolvente, 4 empalme de agua del haz de tubos



1 agua caliente, 2 agua fría, 3 tubo, 4 tubo envolvente;
rojo: agua caliente, azul: agua fría



Captura de pantalla del software: curva de temperatura en flujo paralelo cruzado

Especificación

- [1] cambiador de calor de carcasa y tubos (flujo cruzado) para conexión a WL 110
- [2] alimentación de agua caliente y fría a través de WL 110
- [3] funcionamiento posible en flujo paralelo cruzado y a contracorriente cruzado
- [4] tubo envolvente transparente, haz de tubos visible
- [5] haz de tubos formado por 7 tubos y 4 deflectores
- [6] adquisición de la temperatura a través de WL 110

Datos técnicos

Superficie de transmisión de calor: 200cm²
Haz de tubos, acero inoxidable
- diámetro exterior: 6mm
- grosor de pared: 1mm
Tubo envolvente, transparente (PMMA)
- diámetro exterior: 50mm
- grosor de pared: 3mm

Dimensiones y pesos

LxAnxAI: 400x230x110mm
Peso: aprox. 3kg

Volumen de suministro

1 cambiador de calor de carcasa y tubos

N° de artículo

060.11003 WL 110.03 Cambiador de Calor de Carcasa y Tubos



2E a division of G.U.N.T Gerätebau GmbH, Hanskampring 15-17, D-22885 Barsbüttel, t +49 40 67 08 54-0, f +49 40 67 08 54-42, E-mail sales@gunt.de
Nos reservamos el derecho de efectuar modificaciones técnicas sin previo aviso.

Visit our Websites: www.gunt.de | www.gunt2e.de

I. Característiques generals d'una bomba centrífuga (Lowara)
(Font: www.lowara.com)

20 CENTRÍFUGAS EN ACERO INOX



• Bombas centrífugas horizontales de un impulsor "Serie INOX"

Aplicaciones: utilización de líquidos compatibles con AISI 304 en una amplia variedad de sistemas civiles e industriales. Circulación de agua para uso doméstico. Sistemas de aspersión. Especial uso en aplicaciones industriales. Protección motor IP 55, aislamiento clase F. Presión máx. trabajo 8 bar. Funcionamiento continuo.

Materiales: cuerpo bomba, brida, alojamiento sello difusor e impulsores: AISI 304. Prolongación eje motor y tapones carga y descarga: AISI 316. Sello mecánico: carbón/cerámica/NBR. Juntas tóricas: NBR. Bajo demanda cierres mecánicos con diferentes materiales y juntas.



Consultar:
Modelos CEAN. Cuerpo bomba, brida,
alojamiento sello difusor e impulsor en
AISI 316 L.

Código	Artículo	C. máx. (l/h)	H. máx. mts.	CV	€
Trifásicas 3x220/400V					
EB 20 122	CEA 70/3	4.800	22	0,5	352,00
EB 20 124	CEA 70/5	4.800	31	0,75	368,00
EB 20 126	CEA 80/5	6.000	31,5	1	411,00
EB 20 128	CEA 120/3	9.600	22,5	0,75	406,00
EB 20 130	CEA 120/5	9.600	32	1,2	508,00
EB 20 142	CEA 210/2	18.000	17,5	1	539,00
EB 20 144	CEA 210/3	18.000	21,5	1,5	595,00
EB 20 146	CEA 210/4	18.000	26	2	648,00
EB 20 148	CEA 210/5	18.000	30	2,5	696,00
EB 20 162	CEA 370/1	24.000	16	1,5	740,00
EB 20 164	CEA 370/2	27.000	20	2	764,00
EB 20 166	CEA 370/3	30.000	24	2,5	787,00
EB 20 168	CEA 370/5	31.000	30	4	1.054,00
Monofásicas 1x230					
EB 20 252	CEAM 70/3	4.800	22	0,5	352,00
EB 20 254	CEAM 70/5	4.800	31	0,75	368,00
EB 20 256	CEAM 80/5	6.000	31,5	1	379,00
EB 20 258	CEAM 120/3	9.600	22,5	0,75	406,00
EB 20 260	CEAM 120/5	9.600	32	1,2	473,00
EB 20 272	CEAM 210/2	18.000	17,5	1	499,00
EB 20 274	CEAM 210/3	18.000	21,5	1,5	567,00
EB 20 276	CEAM 210/4	18.000	26	2	643,00
EB 20 292	CEAM 370/1	24.000	16	1,5	787,00
EB 20 294	CEAM 370/2	27.000	20	2	720,00

• Bombas centrífugas horizontales de acero inox. con impulsor abierto y bridas roscadas

Aplicaciones: Lavado y tratamiento de piezas metálicas y/o tratamiento de superficies. Lavado de productos en la industria del embalaje. Equipos y sistemas de lavado en la industria alimentaria. Plantas de tinte e industria textil. Plantas para la circulación y transferencia de líquidos moderadamente viscosos, con baja agresividad química. Lavado industrial y lavavajillas comerciales. Protección del motor IP 55, aislamiento F. Presión máxima de trabajo 8 bar. Funcionamiento continuo. Temperatura: -10°C a 110°C.

Materiales: Cuerpo bomba, brida, alojamiento sello difusor e impulsores en AISI 316. Prolongación del eje del motor AISI 316. Tapones de carga y descarga AISI 316. Sello mecánico Carbón/Cerámica / FPM. Juntas tóricas NBR



Código	Artículo	C. máx. (l/h)	H. máx. mts.	CV	€
Trifásicas 220-240/ 380-415V. 50Hz					
EB 20 302	CO 350/03/A	18.000	9,5	0,5	703,00
EB 20 304	CO 350/05/A	21.000	12	0,7	724,00
EB 20 306	CO 350/07/D	21.000	13,7	1,0	810,00
EB 20 308	CO 350/09/D	24.000	15,7	1,2	818,00
EB 20 310	CO 350/11/D	27.000	17,3	1,5	863,00
EB 20 318	CO 500/30/P	54.000	24,1	4,0	1.125,00
Monofásicas 220-240V - 50Hz					
EB 20 322	COM 350/03/A	18.000	9,5	0,5	703,00
EB 20 324	COM 350/05/A	21.000	12	0,7	724,00
EB 20 326	COM 350/07/A	21.000	13,7	1,0	751,00
EB 20 328	COM 350/09/A	24.000	15,7	1,2	758,00
EB 20 330	COM 350/11/A	27.000	17,3	1,5	818,00
EB 20 336	COM 5000/22/P	48.000	19,6	2,9	1.111,00

J. Propietats i característiques sobre el PEHD (Polietilè d'alta densitat)

(Font: www.eis.uva.es)

PROPIEDADES ELÉCTRICAS	
Constante dieléctrica a 1MHz	2,3-2,4
Factor de disipación a 1MHz	$1 \cdot 10^{-4}$
Resistencia dieléctrica (KV mm ⁻¹)	22
Resistencia superficial (ohm/sq)	10^{13}
Resistencia de volumen (ohm cm)	10^{15} - 10^{18}

PROPIEDADES FÍSICAS	
Absorción de agua en 24h (%)	< 0,01
Densidad (g/cm ³)	0,94-0,97
Índice refractivo	1,54
Resistencia a la radiación	Aceptable
Resistencia al ultra-violeta	Mala
Coefficiente de expansión lineal (K ⁻¹)	2×10^{-4}
Grado de cristalinidad (%)	60-80

PROPIEDADES MECÁNICAS	
Módulo elástico E (N/mm ²)	1000
Coefficiente de fricción	0,29
Módulo de tracción (GPa)	0,5-1,2
Relación de Poisson	0,46
Resistencia a tracción (MPa)	15-40
Esfuerzo de rotura (N/mm ²)	20-30
Elongación a ruptura (%)	12

PROPIEDADES TÉRMICAS	
Calor específico (J K ⁻¹ Kg ⁻¹)	1900
Coefficiente de expansión ($\times 10^6$ K ⁻¹)	100-200
Conductividad térmica a 23 °C (W/mK)	0,45-0,52
Temperatura máxima de utilización (°C)	55-120
Temperatura de reblandecimiento (°C)	140
Temperatura de cristalización (°C)	130-135

RESISTENCIA QUÍMICA	
Ácidos-concentrados	Buena-Aceptable
Ácidos-diluidos	Buena
Alcalís	Buena
Alcoholes	Buena
Cetonas	Buena-Aceptable
Grasas y Aceites	Buena-Aceptable
Halógenos	Aceptable-Buena
Hidro-carbonios halógenos	Aceptable-Buena
Hidrocarburos aromáticos	Aceptable

